

Anomaler Transport in ungeordneten iterierten Abbildungen

von der Fakultät für Naturwissenschaften der Technischen Universität Chemnitz
genehmigte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium

(Dr. rer. nat.)

von Dipl.-Phys. Andreas Fichtner
geboren am 20.09.1978 in Meerane
eingereicht am 18.07.2008

Gutachter: Prof. Dr. Günter Radons, TU Chemnitz

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann, TU Chemnitz

Prof. Dr. Igor Sokolov, HU Berlin

Tag der Verteidigung: 16.02.2009

<http://archiv.tu-chemnitz.de/pub/2009/0070>

Bibliographische Beschreibung

Thema	Anomaler Transport in ungeordneten iterierten Abbildungen
Art der Publikation	Dissertation
Ort	Fakultät für Naturwissenschaften Technische Universität Chemnitz
Verfasser	Andreas Fichtner
Referat	<p>Anomale Diffusion ist nicht an stochastische Kräfte und eine große Zahl von Freiheitsgraden gebunden, sondern ist auch in chaotischen Systemen mit statischer Unordnung in den Bewegungsgleichungen zu beobachten. Einfache Modelle dieser niedrigdimensionalen Systeme, deren Dynamik durch iterierte Abbildungen vermittelt wird, können auf zufällige Irrfahrten in Zufallsumgebungen (<i>random walks in random environments</i>) abgebildet werden.</p> <p>Sinai-Unordnung beschreibt eine spezielle Klasse dieser zufälligen Irrfahrten in Zufallsumgebungen, für die mit dem asymptotischen Verhalten der Entweichrate, der mittleren quadratischen Versetzung, der Zustandsdichte der Relaxationsraten bis hin zu der als Golosov-Phänomen bekannten dynamischen Lokalisierung analytische Resultate für verschiedene anomale Transporteigenschaften bekannt sind. Die vorliegende Arbeit untersucht numerisch eine rekurrente Erweiterung dieses auf Sprünge zu benachbarten Gitterpunkten beschränkten Modells auf die genannten Transporteigenschaften. Als wesentlicher Unterschied stellt sich dabei die Verletzung von detaillierter Balance im stationären Zustand heraus, der Auswirkungen auf das präasymptotische Verhalten der Transportkoeffizienten hat. Asymptotisch zeigt sich hingegen ein Verhalten wie bei der Sinai-Unordnung.</p>
Schlagworte	anomale Diffusion, iterierte Abbildung, Golosov-Phänomen, Sinai-Unordnung, Entweichrate, Entropiezuwachsrates, Irrfahrt

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Modellbeschreibung	9
2.1	Sinai-Unordnung	9
2.1.1	Temkin-Modell	9
2.1.2	Sinai-Unordnung als Grenzfall chaotischer Systeme	11
2.1.3	Kontinuumsmodell und assoziiertes Potential	14
2.2	Verallgemeinerte binäre Unordnung	16
2.2.1	Iterierte Abbildung und Leitermodell	16
2.2.2	Detaillierte Balance	18
3	Mittlere quadratische Versetzung	21
3.1	Golosov-Phänomen	21
3.2	Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent α	22
3.3	Irrfahrt auf einem Streifen	25
4	Zustandsdichte der Relaxationsraten	27
4.1	Spektrum der Übergangsmatrizen	28
4.2	Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent δ	29
4.3	Numerische Bestimmung des Exponenten δ	30
4.3.1	Vollständige Berechnung des Spektrums	31
4.3.2	Näherungslösung mit Greenscher Funktion	36
5	Entweichrate	42
5.1	Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent β	43
5.1.1	Sinai-Unordnung	43
5.1.2	Verallgemeinerte binäre Unordnung	45
5.2	Asymptotisches Verhalten mittels Störungsrechnung	46
5.2.1	Sinai-Unordnung	48
5.2.2	Homogener Fall	51
5.2.3	Störungsrechnung als Näherung für die Entweichrate	52
5.2.4	Verallgemeinerte binäre Unordnung	55
5.3	Präasymptotisches Verhalten	55
6	Stationäre Dichte	60
6.1	Numerische Bestimmung	60
6.2	Sinai-Unordnung	61
6.3	Verallgemeinerte binäre Unordnung	62
7	Entropieproduktion	66
7.1	Herleitung	66
7.1.1	Lebowitz-Spohn-Wirkungsfunktional	66
7.1.2	Entropieproduktion	68
7.2	Beispiele	72

7.2.1	Einfachring	72
7.2.2	Doppelring	74
7.3	Verallgemeinerte binäre Unordnung	77
8	Zusammenfassung und Ausblick	81
A	Zwei gekoppelte Irrfahrten	86
A.1	Fokker-Planck-Gleichung	86
A.1.1	Nomenklatur	86
A.1.2	Zweistufiger Zufallsprozeß	89
A.1.3	Einstufiger Zufallsprozeß	91
A.2	Lösung	92
A.2.1	Charakteristische Funktion	93
A.2.2	Mittelwert	93
A.2.3	Varianz	95

1 Einleitung

„Von den letzten Ursachen der Erscheinungen ist uns nichts bekannt, wir wissen aber, daß alle Naturprozesse einfachen und unveränderlichen Gesetzen unterworfen sind, die man durch Beobachtung klarzulegen vermag. Das Studium derselben ist die Aufgabe der physikalischen Wissenschaft.“

Mit diesen Worten beginnt Joseph Fourier die „Théorie Analytique de la Chaleur“ (Analytische Theorie der Wärme) [1], in der er das Konzept des Wärmestroms einführt. Dieser Begriff ist heute in der theoretischen Physik so allgemein gebräuchlich, daß die Originalität, die er um 1820 bedeutete, heute kaum nachzuvollziehen ist. Immerhin begutachtete Laplace die Arbeit Fouriers jahrelang nicht, bis dieser sie selbst veröffentlichte [2]. Der Wärmestrom formalisiert die Beobachtungen und ermöglicht Fourier die Formulierung der Wärmeleitungsgleichung $\frac{dT}{dt} = \kappa \frac{d^2T}{dx^2}$, für deren Lösung er mit der „Fourier-Analyse“ das mathematische Werkzeug zur Verfügung stellt. Darüber, was den Wärmestrom ausmacht, erscheint es Fourier hingegen wichtig, keine Hypothese aufzustellen. Er sagt, daß er nicht spekulieren möchte, ob der Wärmestrom über Strahlung im Inneren der Festkörper stattfindet, ob ein spezieller Stoff von Molekülen ausgetauscht werde oder ob es sich um Schwingungen wie beim Schall handle [3]. Eine weitsichtige Einstellung, wenn man bedenkt, daß erst die Quantentheorie für Festkörper mit Elektronen in Metallen bzw. Phononen in Nichtmetallen die Antwort liefert [3].¹

Im Grunde war Fourier damit auch dabei, Gesetze für die Teilchendiffusion zu entwickeln. Das Konzept des Wärmestromes auf den Diffusionsstrom zu übertragen blieb dennoch Adolf Fick im Jahre 1855 vorbehalten. Nach dem ersten Fickschen Gesetz ist die Diffusions- oder Teilchenstromdichte proportional zum negativen Gradienten der Konzentration c mit der Diffusionskonstanten D . Aus der Massenerhaltung bzw. der Kontinuitätsgleichung folgt daraus als zweites Ficksches Gesetz die Diffusionsgleichung, die in einer Dimension $\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2}$ lautet [4, 5].

Ficks Ansatz war aber ebenfalls rein phänomenologisch. Erst Albert Einstein konnte 1905 in seiner Arbeit über die Brownsche Bewegung, also die 1827 von dem schottischen Botaniker Robert Brown beschriebene ungeordnete Bewegung von Pollen in Wasser [6],² die Diffusion auf grundlegende Prinzipien zurückführen [7]. Er nimmt an, daß sich nicht nur die gelösten, sondern auch die suspendierten Teilchen nach den Gesetzen der kinetischen Gastheorie bewegen. Aus der Unabhängigkeit der einzelnen suspendierten Teilchen folgert er dann, daß die Diffusionsgleichung nicht nur die Zeitentwicklung der Konzentration $c(x, t)$, sondern auch die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $p(x, t)$ eines einzelnen suspendierten Teilchens wiedergibt:

$$\frac{dp(x, t)}{dt} = D \frac{d^2p(x, t)}{dx^2} \quad (1.1)$$

Die mikroskopische Dynamik wird also durch makroskopische Statistik beschrieben. Gelöst wird Gleichung (1.1) durch die Gaußverteilung $p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp[-\frac{x^2}{4Dt}]$, woraus sofort die auch für unter dem Mikroskop sichtbare Partikel gut meßbare mittlere Versetzung

¹Phononen tragen natürlich auch in Metallen zum Wärmetransport bei, spielen aber nach dem Wiedemann-Franz'schen Gesetz nur eine untergeordnete Rolle.

²Bereits 1785 beschrieb Jan Ingenhousz die Bewegung von Holzkohlestaub in Alkohol.

$\sigma = \sqrt{2Dt}$ angegeben werden kann. Letztere wird heute Einstein-Smoluchowski-Gleichung genannt, da Marian von Smoluchowski auf einem anderen Weg im Jahre 1906 bis auf einen Zahlenfaktor das gleiche Ergebnis erhalten hatte [8]. Sie ermöglichte Jean Perrin über die Messung von σ anhand von Gummigutt-Partikeln in verschiedenen Flüssigkeiten die Existenz von kleinsten Teilchen (Atome, Moleküle) experimentell zu bestätigen [9].³

Einsteins Erklärung geht von der Annahme aus, daß für das suspendierte Teilchen sowohl eine mittlere freie Weglänge als auch eine mittlere Zeit zwischen zwei Stößen existieren. In der Diffusionsgleichung (1.1) kommt dies über die Lösung $p(x, t)$ als Gaußverteilung zum Ausdruck. Gelten hingegen Pareto- oder Lévy-Verteilungen für die Zeit zwischen Stößen oder freie Weglängen, so sind diese Annahmen nicht mehr erfüllt. Dies führt zu anomaler Diffusion, was mit der der Entwicklung von Laserdruckern und Fotokopierern einhergehenden Entdeckung, daß die Ausbreitung von Elektronen und Löchern in amorphen Halbleitern im elektrischen Feld nicht durch Gleichung (1.1) mit Addition eines Driftterms $v \frac{dp}{dx}$ auf der rechten Seite beschrieben werden kann, zum Gegenstand intensiver Forschung wurde. Die Ladungen werden hierbei immer wieder von lokalen Unreinheiten eingefangen und erst in Folge thermischer Fluktuation wieder entlassen. Die Einfangzeiten folgen der Pareto-Verteilung und besitzen damit keinen endlichen Mittelwert. Um die Ausbreitung korrekt zu beschreiben, sind in diesem Fall die gewöhnlichen Ableitungen in Gleichung (1.1) durch fraktionale zu ersetzen. Die mittlere quadratische Versetzung (bzw. Varianz bei Vorhandensein einer Drift) ist dann nicht mehr $\sigma^2 \propto t$ wie bei der normalen Diffusion, sondern $\sigma^2 \propto t^\nu$ mit $\nu < 1$. Ein solches Verhalten wird subdiffusiv genannt und wurde z. B. auch für die Ausbreitung von Kontaminationen im Grundwasser [10] und die Bewegung einiger Proteine auf Zellmembranen beobachtet [11].

Die andere Möglichkeit für anomale Diffusion mit $\nu > 1$, die sogenannte Superdiffusion, ist gegeben, wenn die Zeitspanne für die unveränderte Bewegung der suspendierten Teilchen einer Pareto-Lévy-Verteilung folgt, so daß nicht nur die Wartezeiten, sondern auch die Versetzungen dazwischen keinen Mittelwert besitzen [12]. Eine solche Zufallsbewegung wird *Lévy flight* genannt und ist bspw. bei der Ausbreitung von Partikeln in turbulenten Strömungen zu beobachten [13]. Aber auch die Suchmuster vieler Tiere (z. B. Albatrosse, Bakterien, Schakale), was zur Superdiffusion bei der Ausbreitung in neue Habitate führt [12], und sogar die Ausbreitung von Banknoten erfolgen superdiffusiv [14].⁴

In den frühen 1980iger Jahren wurde entdeckt, daß auch chaotische Systeme Diffusion zeigen können [16, 17, 18, 19]. Die Diffusion ist dabei grundsätzlich von der herkömmlichen Diffusion verschieden, da keine Zufallskräfte auftreten, sondern die Diffusion von einem rein deterministischen nichtlinearen System selbst generiert wird. Konkret wurde in [16] für die eindimensionale iterierte Abbildung $x_{t+1} = x_t - \mu \sin(2\pi x_t)$ beobachtet, daß für $\mu > \mu_c$ das System nicht mehr Periodenverdopplung und die üblichen chaotischen Lösungen zeigt, sondern die mittlere quadratische Versetzung proportional zur Zeit wächst (d. h. normale Diffusion). Subdiffusion [20] und Superdiffusion [21] können ebenfalls in ein-

³Einen lesenswerten historischen Überblick über die Erschließung der Gesetzmäßigkeiten der Diffusion gibt das Buch „Wandern ohne Ziel“ von Gero Vogl [3], das überdies umfangreich Beispiele für Diffusionsprozesse außerhalb von Physik und Chemie beschreibt.

⁴Aber ungewöhnlich schnelle Diffusion ist nicht zwangsläufig Superdiffusion: Der Leiter der Londoner Münze William Roberts-Austen berichtete im Jahr 1900, daß er vier Jahre zuvor dünne Goldscheiben zwischen Bleistäbe geklemmt und im Keller eingelagert hatte. In das Blei war in dieser Zeit bereits sichtbar Gold hineindiffundiert, womit die Diffusion um Größenordnungen schneller als die Selbstdiffusion von Blei verlief. Der genaue Mechanismus dieses speziellen Experiments ist bis heute kontrovers, eine solch anomal schnelle Diffusion wurde aber in den letzten Jahren vor allem an Titanlegierungen untersucht. Dabei zeigt sich jedoch, daß die Bewegung der einzelnen Teilchen einer Gaußverteilung genügt und somit die Diffusion mit Gleichung (1.1) beschrieben werden kann [15].

dimensionalen Abbildungen beobachtet werden, und überdies ist die anomale Diffusion in chaotischen Systemen auch nicht an dissipative Systeme wie die genannte iterierte Abbildung beschränkt, sondern tritt ebenfalls in Hamiltonschen Systemen, wie dem gekickten Rotator, auf [22, 23].

Die meisten der hierauf aufbauenden Untersuchungen, die sich der Konzepte der Nichtgleichgewichtsstatistik [24, 25], der Theorie der periodischen Orbits, des thermodynamischen Formalismus oder der Statistik der *Lévy flights* bedienen [26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33], setzen dabei die Periodizität mindestens einer Variable der Bewegungsgleichungen (bzw. Translationssymmetrie im Phasen- oder Ortsraum) voraus, was die Reduktion des Problems auf eine Einheitszelle gestattet [34]. Dies stellt natürlich eine Beschränkung dar, zumal insbesondere aus der Festkörperphysik bekannt ist, daß statische oder eingefrorene Unordnung die makroskopischen Eigenschaften, wie beispielsweise die Transportkoeffizienten, drastisch ändern kann.

Eine erste Ausnahme hiervon bildet das ungeordnete Lorentz-Gas. Dies ist ein Modell, bei dem eine Punktmasse in der Ebene chaotisch an zufällig platzierten Kreisscheiben gestreut wird. Dieses Modell führt auf normale Diffusion [35]. Kurz darauf wurde allerdings gezeigt, daß statische Unordnung in den Bewegungsgleichungen für eindimensionale iterierte Abbildungen (dissipativ) sogar zur vollständigen Unterdrückung der Diffusion führen kann [36]. Anhand einer speziellen Konstruktion einer gebietserhaltenden Abbildung, der Bäckerabbildung, konnte diese Aussage auch auf Hamiltonsche Systeme übertragen werden [37].

Die iterierten Abbildungen aus [36], die zur völligen Unterdrückung der Diffusion führen, können auf zufällige Irrfahrten (*random walks*) in einer Zufalls Umgebung (*random walks in random environments*, auch *random random walks* oder kurz *RWRE* genannt), abgebildet werden, d. h., die deterministische aber chaotische Bewegung wird auf eine stochastische Bewegung zurückgeführt. Für eine bestimmte Klasse dieser RWRE, die unter dem Stichwort der „Sinai-Diffusion“ zusammengefaßt werden [38, 39] (siehe auch [22, 40]), existieren analytische Ergebnisse zu verschiedenen Kenngrößen des diffusiven Verhaltens. Dies ist zum einen die als Golosov-Phänomen bekannte dynamische Lokalisierung. Eine anfänglich geschlossene Gruppe von Zufallswanderern bewegt sich für alle Zeiten gemeinsam durch die Unordnungsumgebung. Ihre Verteilung strebt einer Grenzverteilung endlicher Breite zu, was zur angesprochenen vollständigen Unterdrückung der Diffusion führt. Das Ensemble von Zufallswanderern kann dabei zwar jeden Gitterpunkt der Unordnungsumgebung besuchen, die mittlere Versetzung pro Zeitintervall erfolgt jedoch anomal langsam. Das asymptotische Verhalten der unordnungsgemittelten mittleren quadratischen Versetzung ist ebenfalls analytisch bekannt. Alle Informationen über die Unordnungsumgebung sind im Propagator enthalten, der die Zeitentwicklung der Dichteverteilung der Zufallswanderer auf einem abgeschlossenen Gebiet steuert. Die Zeitskala, auf der sich die Verteilung der Random walker der stationären Verteilung nähert, ist durch die Relaxationsraten gegeben. Das asymptotische Verhalten deren Zustandsdichte ist ebenso bekannt wie die Entweichraten aus Regionen des Zustandsraums.⁵

Damit eine iterierte Abbildung auf die Sinai-Unordnung übertragen werden kann, darf sie in einem Zeitschritt lediglich Punkte von einer Einheitszelle in die direkt benachbarten abbilden, was die Frage aufwirft, in welcher Form die dort getroffenen Aussagen auf allgemeinere Modelle zu übertragen sind. Die vorliegende Arbeit untersucht den Fall der *verallgemeinerten binären Unordnung*, bei dem auch die übernächste Zelle in einem Zeitschritt erreicht werden kann, und bezieht sich dabei auf die iterierten Abbildungen von [36] bzw. [34]. In einer früheren Arbeit wurde numerisch gezeigt, daß sich die verallgemeinerte binäre Unordnung nach den gleichen Gesetzmäßigkeiten wie die Sinai-Unordnung verhält,

⁵Letztere sind unmittelbar mit den mittleren Ersterreichungszeiten (*mean first passage times*) verknüpft.

1 Einleitung

wobei die den asymptotischen Beziehungen von mittlerer quadratischer Versetzung, Zustandsdichte der Relaxationsraten und Entweichrate zugeordneten charakteristischen Exponenten eine Abhängigkeit von den Systemparametern zeigen [41]. Doch handelte es sich hierbei wirklich um das asymptotische Verhalten, das sich numerisch sehr schlecht erfassen läßt? Die ausführlicheren Betrachtungen in den folgenden Kapiteln weisen vielmehr auf ein komplexes, von den Systemparametern abhängendes, präasymptotisches Verhalten der genannten Größen hin, das dort beobachtet wurde.

Die Arbeit ist wie folgt aufgebaut: In Kapitel 2 wird zunächst das Modell vorgestellt, wobei in Abschnitt 2.1.1 die Sinai-Unordnung beschrieben wird, während der Rest des Kapitels der Übertragung der iterierten Abbildung auf die Sinai-Unordnung bzw. deren Erweiterung gewidmet ist. Die folgenden drei Kapitel beschäftigen sich mit den erwähnten Kenngrößen des diffusiven Verhaltens, vergleichend für die Sinai-Unordnung und die verallgemeinerte binäre Unordnung. Für die Bestimmung dieser Größen ist die stationäre Dichte von zentraler Bedeutung, die in Kapitel 6 betrachtet wird. Ein wesentlicher Unterschied zwischen der Sinai-Unordnung und der verallgemeinerten binären Unordnung ist der Verlust von detaillierter Balance im stationären Zustand. Die Stärke der Verletzung von detaillierter Balance wird anhand der Entropieproduktionsrate und eines weiteren Wirkungsfunktionals in Kapitel 7 untersucht. Kapitel 8 faßt schließlich die Ergebnisse zusammen.

2 Modellbeschreibung

2.1 Sinai-Unordnung

Die Computersimulationen von Temkin (1972) [42]¹ bilden den Auftakt für die Untersuchung von Random walks in eindimensionalen Zufallsumgebungen. In der Natur ist eine solche Zufallsumgebung in idealisierter Form beispielsweise mit dem DNS-Molekül gegeben. Deren Doppelhelix wird aus zwei Basenpaaren (Adenin-Thymin und Guanin-Cytosin) gebildet, die sich in ihrer thermodynamischen Stabilität unterscheiden. Die Suche der RNS-Polymerase nach der passenden Promotorsequenz, die den Anfang des für die Transkription vorgesehenen DNS-Abschnitts anzeigt, kann dann als Random walk auf der DNS beschrieben werden [44].

Die Sinai-Unordnung ist der rekurrente Grenzfall des allgemeineren Temkin-Modells.

2.1.1 Temkin-Modell

Die eindimensionale Zufallsumgebung sei als lineare Kette \mathcal{S} mit den Gitterpunkten $i \in \mathcal{S}$ gegeben, die durch ganze Zahlen gekennzeichnet sind. In einem Zeitschritt seien lediglich Sprünge eines Zufallswanderers von einem Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ zu unmittelbar benachbarten Gitterpunkten $i \pm 1 \in \mathcal{S}$ erlaubt, d. h., alle Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ für Sprünge von $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ mit $j \notin \{i - 1, i + 1\}$ sind null. Die Wahrscheinlichkeit $p_{i,i}$ am Ort $i \in \mathcal{S}$ zu bleiben sei zunächst ebenfalls null, so daß

$$p_{i,j} = A_i \delta_{j,i+1} + (1 - A_i) \delta_{j,i-1} \quad (2.1)$$

gilt. A_i ist hierbei eine ortsabhängige Zufallsvariable, die zu Beginn für alle $i \in \mathcal{S}$ festgelegt und für alle Zeiten beibehalten wird (*quenched disorder*). Eine konkrete Realisierung der Unordnungsumgebung $\{A_i\}$ werde mit ω bezeichnet, die Klasse aller möglichen Unordnungsrealisierungen mit Ω .

Das Auftreten zweier Zufallsgrößen, zum einen die konkrete Unordnungsrealisierung $\omega \in \Omega$, zum anderen der Random walk auf ω , erfordert Unterscheidungen in Sprache und Notation. Mit Überstrich werden Erwartungswertbildungen über die Unordnungsrealisierungen

$$\overline{f(\omega)} = E_\omega f(\omega) = \int_\Omega f(\omega) d\omega \quad (2.2)$$

bezeichnet. Erwartungswertbildungen über Random walks in einer fixen Umgebung ω werden hingegen durch spitze Klammern $\langle \cdot \rangle$ angezeigt.

Eine wichtige Eigenschaft von Random walks ist die Rekurrenz. Ein (diskreter) Random walk heißt linksrekurrent, wenn er für jede Exkursion nach links vom Startpunkt $i \in \mathcal{S}$ aus mit Wahrscheinlichkeit eins wieder zu $i \in \mathcal{S}$ zurückkehrt. Die Rechtsrekurrenz ist analog definiert. Ein Random walk heißt rekurrent, wenn er sowohl links- als auch rechtsrekurrent ist.² Bezeichne A eine typische Zufallsvariable aus der Menge $\{A_i\}$ und seien die Wahrscheinlichkeiten der Ereignisse $A = 0$ und $A = 1$ null, dann gilt:

¹Das Modell selbst weist etliche mathematische Parallelen zu dem von Chernov (1967) [43] studierten Modell der DNS-Replikation auf [40].

²Random walks, bei denen die Wahrscheinlichkeit, zum Ausgangspunkt zurückzukehren, kleiner als eins ist, heißen transient.

Theorem 2.1.1 (Solomon [45]) *Das Temkin-Modell ist*

- *rechtsrekurrent dann und nur dann, wenn $\overline{\log \left[\frac{1-A}{A} \right]} \geq 0$.*
- *linksrekurrent dann und nur dann, wenn $\overline{\log \left[\frac{A}{1-A} \right]} \geq 0$.*

Die notwendige und hinreichende Rekurrenzbedingung lautet damit $\overline{\log \left[\frac{A}{1-A} \right]} = 0$.

Das Sinai-Problem ist der vollständig rekurrente Grenzfall des Temkin-Problems. Hierfür gilt:

Theorem 2.1.2 (Sinai [38]) *Sei $\overline{\log \frac{A}{1-A}} = 0$ und $0 < \sigma^2 = \overline{\log^2 \frac{A}{1-A}} < \infty$. Dann wächst die Versetzung $|X_n|$ nach einer großen Zahl von Schritten n wie $\log^2 n$ im folgenden Sinne. Es existiert eine Funktion $m_n(\omega)$ der Umgebung ω , so daß für jedes $\epsilon > 0$*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left(\left| \frac{X_n(\omega)}{\log^2 n} - m_n(\omega) \right| > \epsilon \right) = 0 \quad (2.3)$$

Die Wahrscheinlichkeit wird dabei über alle Random walks genommen, die beim Gitterpunkt 0 in ω starten.

Darüber hinaus gibt es eine Zufallsvariable L , so daß die Verteilung (unter Beachtung sowohl der Zufallsumgebung als auch der Random walks) der Zufallsvariablen $\sigma^2 \frac{X_n(\omega)}{\log^2 n}$ schwach gegen L konvergiert.³

Während bei einem Random walk auf einer eindimensionalen Kette mit gleichen Übergangswahrscheinlichkeiten an jedem Gitterpunkt (d. h. $A_i = \frac{1}{2}$ für alle $i \in \mathcal{S}$ in Gleichung (2.1)) für die Versetzung $|X_n(\omega)| \propto \sqrt{n}$ gilt, woraus normale Diffusion mit $\langle X_n^2(\omega) \rangle - \langle X_n(\omega) \rangle^2 \propto n$ folgt, führt die eingefrorene Unordnung der Übergangswahrscheinlichkeiten zu einem Skalenverhalten proportional zu $\log^2 n$. Das System kann damit keine normale Diffusion aufweisen, was Gegenstand von Abschnitt 3.1 sein wird.

Eine heuristische Ableitung des Sinai-Theorems 2.1.2 ist in [48] bzw. [40] gegeben: Es werden nur Exkursionen nach rechts vom Gitterpunkt null betrachtet, die Rechnung für Exkursionen nach links folgt durch Vertauschen von $1-A$ und A . Für eine feste Umgebung ω sei $u_m(l)$ die Wahrscheinlichkeit für einen bei $l > 0$ startenden Random walk, den Gitterpunkt 0 vor dem Gitterpunkt m ($0 < l < m$) zu besuchen. Im nächsten Zeitschritt kann der Random walk mit Wahrscheinlichkeit $(1-A_l)$ nach links oder mit A_l nach rechts gehen. An den neuen Gitterpunkten gelten dann $u_m(l-1)$ bzw. $u_m(l+1)$, so daß sich die Differenzengleichung

$$u_m(l) = (1-A_l)u_m(l-1) + A_l u_m(l+1) \quad (2.4)$$

mit den Randbedingungen $u_m(0) = 1$ und $u_m(m) = 0$ ergibt. Für $u_m(l+1) - u_m(l)$ folgt

³Golosov [46] und Kesten [47] haben unabhängig voneinander gezeigt, daß L die Dichtefunktion

$$\frac{d}{dx} P(L \leq x) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1} \exp \left[-\frac{(2k+1)^2 \pi^2}{8} |x| \right]$$

besitzt.

daraus eine Iterationsgleichung

$$\begin{aligned} u_m(l+1) - u_m(l) &= \frac{1 - A_l}{A_l} (u_m(l) - u_m(l-1)) \\ &= \left(\prod_{j=1}^l \frac{1 - A_j}{A_j} \right) \underbrace{(u_m(1) - u_m(0))}_{u_m(1)-1} \end{aligned} \quad (2.5)$$

deren Summation von $l = 0$ bis $m - 1$ auf

$$\sum_{l=0}^{m-1} (u_m(l+1) - u_m(l)) = (u_m(1) - 1) \left(\sum_{l=0}^{m-1} \prod_{j=1}^l \frac{1 - A_j}{A_j} \right) \quad (2.6)$$

führt. Die linke Seite ergibt $u_m(m) - u_m(0)$, also -1 bei Berücksichtigung der Randbedingungen, so daß

$$1 - u_m(1) = \left(\sum_{l=0}^{m-1} \prod_{j=1}^l \frac{1 - A_j}{A_j} \right)^{-1} \quad (2.7)$$

folgt. $1 - u_m(1)$ ist die Wahrscheinlichkeit w_m , daß ein am Gitterpunkt 1 startender Random walk den Gitterpunkt m vor dem Gitterpunkt 0 erreicht. Der Ausdruck

$$T_l = \sum_{j=1}^l \log \frac{1 - A_j}{A_j} \quad (2.8)$$

kann als Versetzung eines eindimensionalen Random walks (die A_i sind unabhängig) mit Start bei null nach l Schritten aufgefaßt werden. Der Erwartungswert $\overline{T_l}$ ist nach Voraussetzung in Theorem 2.1.2 null, die Varianz $\overline{T_l^2} = l \cdot \sigma^2$. Es gilt folglich $|T_l| \in \mathcal{O}(\sqrt{l})$ und somit

$$w_m = 1 - u_m(1) = \left[1 + \sum_{l=1}^{m-1} \exp T_l \right]^{-1} \propto \exp \left[-m^{\frac{1}{2}} \right] \quad (2.9)$$

Dieses Ergebnis kann auch so formuliert werden, daß der bei 1 startende Random walker den Ursprung ungefähr $\exp[m^{\frac{1}{2}}]$ mal besucht, ehe er den Gitterpunkt m erreicht, was aus der entsprechenden Erwartungswertbildung

$$\sum_{j=1}^{\infty} j(1 - w_m)^j w_m = -w_m(1 - w_m) \frac{d}{dw_m} \left(\sum_{j=0}^{\infty} (1 - w_m)^j - 1 \right) = \frac{1 - w_m}{w_m} \quad (2.10)$$

mit $w_m \approx \exp[-m^{\frac{1}{2}}]$ folgt. Daß der erste Besuch von m (*first passage*) somit wenigstens $\exp[m^{\frac{1}{2}}]$ Schritte erfordert, liefert ein Skalenverhalten zwischen Entfernung und Zeit. Es ist demnach zu erwarten, daß die Versetzung in m Schritten $O(\log^2 m)$ nicht übersteigt.

2.1.2 Sinai-Unordnung als Grenzfall chaotischer Systeme

Ein einfaches, häufig untersuchtes Beispiel für dissipative Systeme mit chaotischen Transporteigenschaften ist die gedämpfte Bewegung eines periodisch getriebenen Partikels in einem periodischen Potential, womit bspw. superionische Leiter im externen Feld modelliert werden können. Aktuell ist dieses Beispiel im Zusammenhang mit Ratschen (*ratchet physics*) von Interesse [34]. Vereinfachungen dieses Modells, die weiterhin die wesentlichen Eigenschaften tragen, sind durch eindimensionale iterierte Abbildungen gegeben

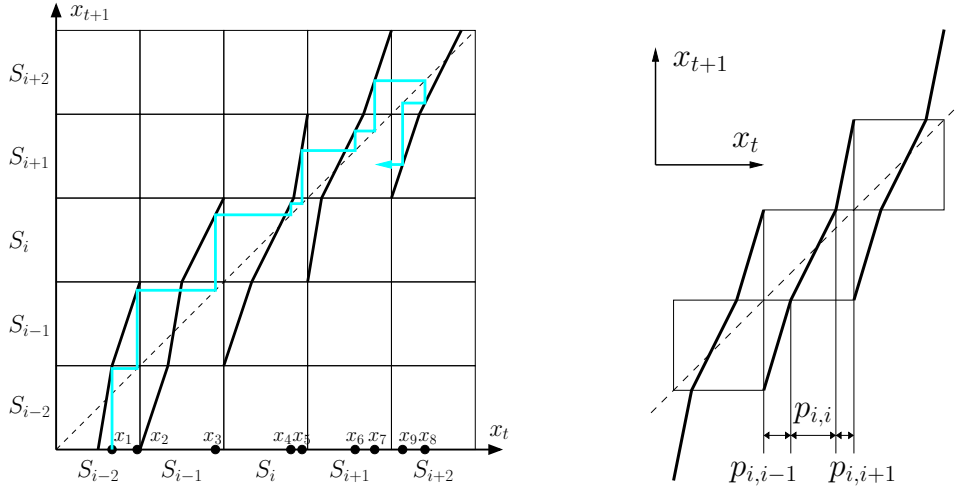


Abbildung 2.1: Links: Die Abbildung $x_{t+1} = f(x_t)$ weist nur an den Grenzen der Einheitszellen S_i Unstetigkeiten auf und bildet Punkte des Intervalls S_i nach $\bigcup_{j=i-1}^{i+1} S_j$ ab. Ein Pfad (im Beispiel $\{x_1, \dots, x_9\}$) kann geometrisch durch wechselseitige Reflexion an $f(x_t)$ und der gestrichelt dargestellten Winkelhalbierenden konstruiert werden. Rechts: Die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ sind durch die entsprechenden Anstiege von $f(x_t)$ gegeben.

[16, 19, 18, 17]. Da bekannt ist, daß eingefrorene Unordnung (*quenched disorder*) die makroskopischen Eigenschaften eines Systems (z. B. Transporteigenschaften) erheblich ändern kann, ist das Verständnis der Effekte statischer Unordnung in solchen Systemen von großem Interesse [34]. Im folgenden wird gezeigt, wie ungeordnete iterierte Abbildungen auf Random walks in Zufallsumgebungen übertragen werden können.

Und zwar kann die Sinai-Unordnung als Spezialfall einer iterierten Abbildung

$$x_{t+1} = f(x_t) \quad (2.11)$$

mit $x_t \in \mathbb{R}$ und $t \in \mathbb{N}_0$ in folgendem Sinne aufgefaßt werden: Sei $\{S_i\}$ eine Partitionierung der reellen Achse in halboffene Intervalle $S_i = [i, i+1)$ mit $i \in \mathbb{Z}$. Diese Intervalle werden im weiteren synonym als Zellen bezeichnet. In jedem einzelnen dieser Intervalle bzw. Zellen ist $f(x)$ stetig, monoton steigend und stückweise linear. Anstiegsänderungen von $f(x)$ sind nur an Punkten x_k mit $f(x_k) = i$, $i \in \mathbb{Z}$ erlaubt. Dies schließt ein, daß $f(x)$ für jedes $x_i \in \mathbb{Z}$ (linke Zellengrenze) auch immer ganzzahlig ist und wenn sich x von links einer Zellengrenze nähert, dann auch $f(x)$ gegen eine ganze Zahl strebt. Eine weitere Beschränkung besteht darin, daß $f(x)$ nur Punkte eines Intervalls auf sich selbst oder in unmittelbar benachbarte Intervalle abbilden darf, d.h.

$$f(x) : x \in S_i \rightarrow \{S_{i-1}, S_i, S_{i+1}\} \quad (2.12)$$

Die Bewegung in einer solchen Abbildung erfolgt für einen festgelegten Startpunkt vollständig deterministisch. Graphisch läßt sich der Weg durch die Abbildung verfolgen, indem im $(x_t - x_{t+1})$ -Diagramm eine Linie wechselseitig an $f(x)$ und der Winkelhalbierenden $x_t = x_{t+1}$ rechtwinklig reflektiert wird. Die eigentliche Bewegung, d.h. die Folge $\{x_t : t \geq 0\}$, ist durch die Projektionen der Schnittpunkte des Pfades mit $f(x)$ auf die x_t -Achse gegeben. Abb. 2.1 (links) faßt die Überlegungen zusammen.

Die Zeitentwicklung einer Verteilung von Startpunkten wird durch den Frobenius-Per-

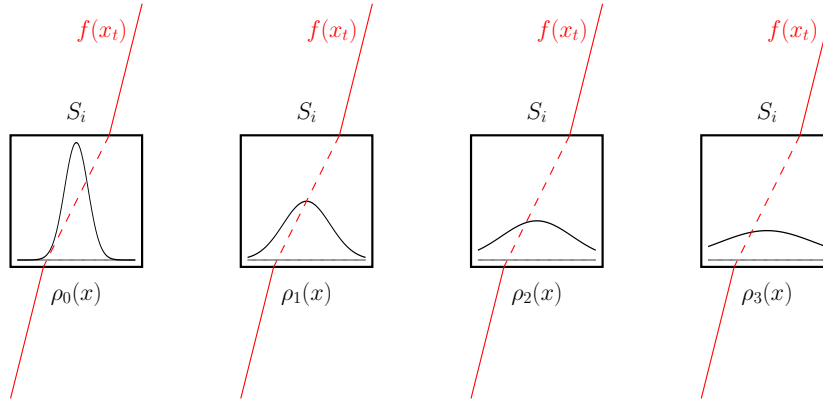


Abbildung 2.2: Eine initiale Dichteverteilung sei durch die Gaußverteilung $\rho_0(x)$ in Zelle S_i im linken Bild gegeben. Die folgenden Bilder zeigen die nächsten drei Zeitschritte bei Anwendung von $f(x_t)$ für die Dichteverteilung $\rho_t(x)$ der Punkte, die von S_i wieder nach S_i abgebildet werden. Es ist zu erkennen, wie sich $\rho_t(x)$ bereits nach wenigen Schritten einer konstanten Dichte in der Zelle S_i annähert.

ron-Operator \mathcal{P} vermittelt. Und zwar gilt für die Verteilung $\rho_{t+1}(x)$ zum Zeitpunkt $t + 1$

$$\rho_{t+1}(x) = \mathcal{P}[\rho_t(x)] = \int \rho_t(y) \delta[f(y) - x] dy \quad (2.13)$$

Bei Start mit einer Dichtefunktion $\rho_0(x)$, die in jeder Zelle S_i einen bezüglich x konstanten Wert $\rho_0(x \in S_i) = \pi_i(0)$ annimmt, wird die Dichtefunktion für alle Zeiten $t \geq 0$ bezüglich x konstant in jeder Zelle sein, d. h. $\rho_t(x \in S_i) = \pi_i(t)$. Gleichung (2.13) kann dann durch

$$\pi_j(t+1) = \sum_i \pi_i(t) p_{i,j} \quad \text{mit} \quad p_{i,j} = \frac{1}{|f'_{i,j}|} \quad (2.14)$$

ersetzt werden, wobei $f'_{i,j}$ die Ableitung des Teiles von $f(x)$ bezeichnet, der Punkte aus dem Intervall S_i in das Intervall S_j abbildet, vgl. Abb. 2.1 (rechts). Die $p_{i,j}$ sind damit als Übergangswahrscheinlichkeiten aufzufassen und bilden die Einträge einer, im Prinzip unendlich großen, Markovschen Übergangsmatrix \mathbf{P} . Da lediglich Übergänge von einer Zelle in diese selbst oder in direkt angrenzende Zellen erlaubt sind, ist \mathbf{P} eine tridiagonale stochastische Matrix, d.h., die Zeilensumme $\sum_j p_{i,j}$ ist eins für alle Zeilen i . Erfüllt die Funktion $f(x_t)$ überdies noch $\log \frac{f'_{j,i}}{f'_{i,j}} = \log \frac{p_{i,j}}{p_{j,i}} = 0$, so ist der rekurrente Grenzfall des Temkin-Modells, die Sinai-Unordnung aus Abschnitt 2.1.1, eine äquivalente Beschreibung des dissipativen chaotischen System von Abb. 2.1 (links).⁴

Der Übergang von Gleichung (2.13) zu Gleichung (2.14) ist jedoch nicht an eine in jeder Zelle bezüglich x konstante Startverteilung $\rho_0(x)$ gebunden, denn jede hinreichend glatte initiale Dichteverteilung konvergiert exponentiell schnell gegen eine in jeder Zelle bezüglich x konstante Dichte, wie Abb. 2.2 illustriert. Die iterierte Abbildung $x_{t+1} = f(x_t)$ ist folglich allgemeiner als das Markov-Modell (2.14), d. h. den Random walk auf einer eindimensionalen Kette \mathcal{S} mit den Gitterpunkten $i \in \mathcal{S}$ und Nächstnachbarübergängen (vgl. Abb. 2.3).

Numerische Simulationen von Systemen mit Sinai-Unordnung in den folgenden Kapi-

⁴Die Sinai-Unordnung in Abschnitt 2.1.1 wurde für $p_{i,i} = 0, \forall i \in \mathbb{Z}$ formuliert. Zu den Theoremen 2.1.1 und 2.1.2 analoge Aussagen können auch getroffen werden, wenn $p_{i,i}$ ebenfalls eine Zufallsvariable und / oder die Markov-Kette halbbeschränkt ist, d.h., reflektierende Randbedingungen am Gitterpunkt null gegeben sind. [46]

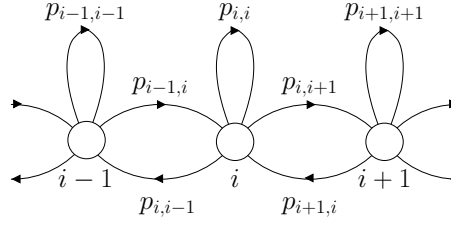


Abbildung 2.3: Der Übergangsgraph des Markov-Prozesses ist eine eindimensionale Kette mit Sinai-Unordnung.

ten beschränken sich auf den binären Fall. Hierbei stehen für die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_i = \{p_{i,i-1}, p_{i,i}, p_{i,i+1}\} \quad (2.15)$$

für Sprünge im nächsten Zeitschritt ausgehend vom Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ nur zwei Möglichkeiten

$$\mathbf{p} = \{a^-, a, a^+\} \quad \text{und} \quad \hat{\mathbf{p}} = \{a^+, a, a^-\} \quad (2.16)$$

zur Verfügung, die mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ an jedem Ort $i \in \mathcal{S}$ zu Beginn gewählt werden. Die Voraussetzungen der Theoreme 2.1.1 und 2.1.2 sind damit trivialerweise erfüllt. Dieses Vorgehen erlaubt zum einen die gezielte Annäherung an den symmetrischen Fall, bei dem sich das Verhalten grundsätzlich zu $|X_n| \propto \sqrt{n}$ ändert. Zum anderen ist damit ein besserer Vergleich der numerischen Ergebnisse mit jenen der Systeme aus Abschnitt 2.2.1 möglich, denen ebenfalls eine solche Konstruktion zugrundeliegt.

2.1.3 Kontinuumsmodell und assoziiertes Potential

Die Sinai-Unordnung aus Abschnitt 2.1.1 kann auch für kontinuierliche Markov-Prozesse formuliert werden. Im Kontinuumslimit, d.h., sowohl der zeitliche Abstand zwischen zwei Sprüngen als auch der Gitterabstand gehen (geeignet) gegen null, wird die Irrfahrt $x(t)$ eines Teilchens in einem Gebiet mit Sinai-Unordnung durch die Langevin-Gleichung

$$\dot{x} = F(x) + \xi(t) \quad (2.17)$$

vermittelt [22].⁵ $\xi(t)$ bezeichnet hierbei Gaußsches Weißes Rauschen in der Zeit t und $F(x)$ Weißes Rauschen im Ort x mit Mittelwert $\overline{F(x)} = 0$. Folglich ist das Ortspotential $V(x) = -\int^x F(x')dx'$ selbst der Pfad einer Brownschen Bewegung bzw. ein Wiener-Prozeß, und $F(x) = -\frac{dV}{dx}$ treibt das Teilchen in lokale Minima von $V(x)$. Das zeitliche Gaußsche Weiße Rauschen $\xi(t)$ führt dazu, daß das Teilchen nicht in einem lokalen Minimum von $V(x)$ stecken bleibt, sondern sich durch die Potentiallandschaft $V(x)$ auf der Suche nach immer tieferen Minima bewegt, die aufgrund des Skalenverhaltens von $V(Lx) \sim \sqrt{L}V(x)$ mit zunehmendem erkundeten Gebiet auftauchen.

Die Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte von Partikeln, die sich gemäß Gleichung (2.17) bewegen, ist durch die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial p(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ -F(x)p(x,t) + D \frac{\partial}{\partial x} p(x,t) \right\} \quad (2.18)$$

gegeben. Der Parameter D bezeichnet hierbei die Hälfte der orts- und zeitunabhängi-

⁵Die Bewegung ist überdämpft, d.h. der Beschleunigungsterm $\gamma\ddot{x}$ ist viel kleiner als der Reibungsterm und kann daher vernachlässigt werden.

gen Varianz des Weißen Rauschens $\xi(t)$. Auf einem endlichen System (mit reflektierenden Randbedingungen) ist im stationären Zustand detaillierte Balance erfüllt. Drift- und Diffusionsstrom heben sich folglich auf, womit der Ausdruck in geschweiften Klammern verschwindet und sich aus der Differentialgleichung $\frac{\partial p(x)}{\partial x} = \frac{F(x)}{D} p(x)$ die stationäre Dichte

$$p(x) = C \exp \left[-\frac{1}{D} V(x) \right] \quad (2.19)$$

ergibt. Die stationäre Dichte wird also (bis auf Vorfaktoren) vollständig durch $V(x)$ bestimmt.

Analog kann auch für die stationäre Lösung π_i im diskreten Fall über die für Nächstnachbar-Random-walks immer erfüllte detaillierte Balance

$$\pi_i p_{i,i+1} = \pi_{i+1} p_{i+1,i} \quad (2.20)$$

ein Potential V_i

$$\pi_{i+1} = \pi_i \frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}} = \pi_1 \prod_{l=1}^i \frac{p_{l,l+1}}{p_{l+1,l}} \equiv \pi_1 e^{-V_{i+1}} \quad (2.21)$$

definiert werden. Ebenso kann

$$V_{i+1} = - \sum_{l=1}^i \log \frac{p_{l,l+1}}{p_{l+1,l}} \quad (2.22)$$

selbst als Pfad einer diskreten symmetrischen Irrfahrt mit den Zuwächsen $\Delta_i = V_{i+1} - V_i = \log \frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}}$ betrachtet werden. Δ_i hängt dabei von Δ_{i-1} ab, da sich aus $p_{i-1,i-2}$ über die Normierung $\sum_j p_{i-1,j} = 1$ zumindest eine Einschränkung für $p_{i-1,i}$ ergibt. Der zweistufige Markov-Prozeß $\{(V_i, V_{i-1})^T, i \in \mathbb{N}\}$ weist jedoch unabhängige Zuwächse ohne Vorzugsrichtung auf, so daß für infinitesimal werdende Gitterabstände und geeignet gegen null gehende Inkremente das diskrete Potential V_i in den Pfad der kontinuierlichen Brownschen Bewegung übergeht.⁶ Die Normierung $\sum_{j=1}^L \pi_j = 1$ der stationären Dichte (2.21) wird schließlich über die Dichte π_1 am linken Rand

$$\pi_1 = \frac{1}{1 + \sum_{i=2}^L e^{-V_i}} \equiv \frac{1}{Z_L} \quad (2.23)$$

mit der Zustandssumme Z_L realisiert.

Wie die Bewegung eines einzelnen Zufallswanderers in dem diskreten Potential V_i erfolgt, verdeutlicht Abb.2.4. Der Random walker ist im wesentlichen in der Umgebung eines lokalen Minimums zu finden und wandert mit der Zeit zu immer tieferen Minima. Es ist ebenfalls zu erkennen, daß die Aufenthaltsdauer in einem Minimum von dessen Tiefe bzw. der Höhe und Breite der Barriere zum nächsten Minimum bestimmt wird.

Das Potential V_i als Pfad einer (diskreten) Brownschen Bewegung ermöglicht eine anschauliche Begründung des anomalen Skalenverhaltens $|X_n(\omega)| \propto \log^2 n$ aus Theorem 2.1.2. Und zwar benötigt ein Teilchen, um eine Barriere der Höhe $c \log n$ zu überwinden, eine Zeit proportional zu $\exp[c \log n]$,⁷ womit sich ein geeignetes c finden läßt, so daß die

⁶Die nur geringfügig gegen V_{i+1} verschobene Größe $\hat{V}_{i+1} = V_{i+1} - \log p_{i+1,i+2}$ weist unabhängige Zuwächse $\hat{V}_{i+1} - \hat{V}_i = \log \frac{p_{i+1,i}}{p_{i+1,i+2}}$ auf, so daß V_{i+1} und \hat{V}_{i+1} asymptotisch das gleiche Verhalten zeigen.

⁷Dies entspricht dem Arrhenius-Gesetz, das die Geschwindigkeit einer chemischen Reaktion in Abhängigkeit von der Aktivierungsenergie E_a und der Temperatur T mit $k(T) = \nu \exp[-\frac{E_a}{k_B T}]$ angibt. Die Rate $k(T)$ ist die mittlere Zahl der Ereignisse pro Zeitintervall, woraus durch Umkehrung folgt, daß die mittlere Zeit für das Eintreten eines Ereignisses proportional zu $\exp[\frac{E_a}{k_B T}]$ ist.

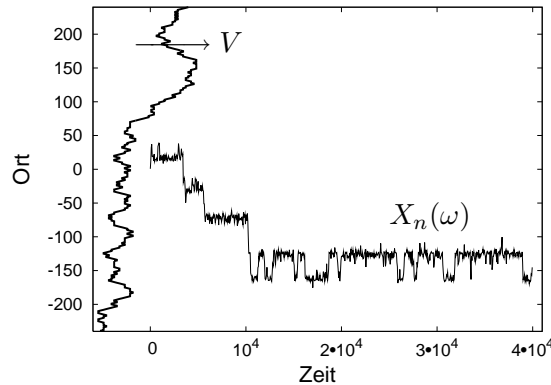


Abbildung 2.4: Pfad $X_n(\omega)$ eines einzelnen Zufallswanderers in einer Umgebung ω mit Sinai-Unordnung. Am linken Rand ist das Potential V_i über den einzelnen Gitterpunkten aufgetragen. Der Zufallswanderer erreicht mit fortschreitender Zeit n immer tiefere Potentialsenken, aus denen er zunehmend schwerer entkommen kann.

Zeit von der Ordnung n ist. Der in der Zeit n zurückgelegte Weg des RWRE wiederum kann nicht größer als die Distanz sein, in der das Potential die Höhe $c \log n$ erreicht. Aufgrund des Skalenverhaltens der Brownschen Bewegung⁸ ist diese Distanz von der Ordnung $\log^2 n$ [49].

2.2 Verallgemeinerte binäre Unordnung

Das Temkin-Modell aus Abschnitt 2.1.1 beschreibt die Bewegung auf einer eindimensionalen Kette, bei der in einem Zeitschritt nur Sprünge zu den unmittelbar benachbarten Gitterpunkten möglich sind. Die Sinai-Unordnung ist der rekurrente Grenzfall dieses Systems. In diesem Abschnitt soll das Modell auf Sprünge zu übernächsten Nachbarn erweitert werden, wobei die Rekurrenz durch eine bestimmte Wahl der Übergangswahrscheinlichkeiten gewährleistet wird.

2.2.1 Iterierte Abbildung und Leitermodell

Den Ausgangspunkt bilden wie in Abschnitt 2.1.2 durch iterierte Abbildungen gegebene dynamische Systeme. Ebenfalls wie in Abschnitt 2.1.2 seien Zellen S_i auf der reellen Achse definiert, deren Punkte allerdings über eine Funktion $f(x)$ im nächsten Zeitschritt bis maximal zu den übernächsten Zellen abgebildet werden. Bis auf diese Änderung gelten die gleichen Beschränkungen für $f(x)$, so daß sich eine Unordnungsrealisierung wie in Abb. 2.5 ergibt. Eine in jeder einzelnen Zelle S_i bezüglich x konstante Startverteilung $\rho_0(x \in S_i) = \pi_i(0)$ bleibt dann für alle Zeiten bezüglich x konstant, d. h. $\rho_t(x \in S_i) = \pi_i(t)$, womit die Wahrscheinlichkeit $p_{i,j}$, mit der ein mit Gleichverteilung aus der Zelle S_i gewählter Punkt nach S_j abgebildet wird, wieder dem Anstieg von $f(x)$ an der entsprechenden Stelle entnommen werden kann.⁹ Die aus den Einträgen $p_{i,j}$ gebildete Übergangsmatrix \mathbf{P} , die gemäß Gleichung (2.14) die Zeitentwicklung von $\pi_i(t)$ steuert, ist nun pentadiagonal.

Eine äquivalente Darstellung ist durch die Irrfahrt auf einer eindimensionalen Kette \mathcal{S} mit den durch ganze Zahlen gekennzeichneten Gitterpunkten $i \in \mathcal{S}$ gegeben. Die Rekurrenz wird dadurch gesichert, daß für die von null verschiedenen Wahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$, vom

⁸Die Standardabweichung wächst mit der Quadratwurzel der Entfernung.

⁹Analog zu Abb. 2.2 konvergieren auch hier hinreichend glatte Dichteverteilungen exponentiell schnell gegen eine in jeder Zelle S_i bezüglich x konstante Dichte $\pi_i(t)$, so daß der Übergang zur Markov-Kette nicht an eine stückweise konstante Anfangsverteilung gebunden ist.

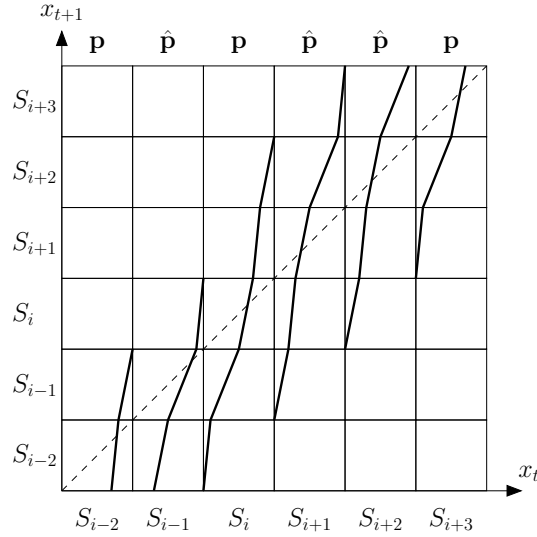


Abbildung 2.5: Stückweise stetige Abbildung, für die für jede Zelle S_i nur zwei Möglichkeiten gegeben sind, wie Punkte nach $\bigcup_{j=i-2}^{i+2} S_j$ abgebildet werden können. Die zugehörige Markov-Kette weist entsprechend die beiden Sätze \mathbf{p} und $\hat{\mathbf{p}}$ von Übergangswahrscheinlichkeiten auf.

Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ zu springen,

$$\mathbf{p}_i = \{p_{i,i-2}, p_{i,i-1}, p_{i,i}, p_{i,i+1}, p_{i,i+2}\} \quad (2.24)$$

lediglich zwei Sätze von Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p} = \{a^{--}, a^-, a, a^+, a^{++}\} \quad (2.25)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = \{a^{++}, a^+, a, a^-, a^{--}\} \quad (2.26)$$

zur Verfügung stehen. Der Parametersatz $\hat{\mathbf{p}}$ ist dabei die am mittleren Eintrag a gespiegelte Version von \mathbf{p} . Für jeden Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ wird zu Beginn mit gleicher Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ entweder \mathbf{p} oder $\hat{\mathbf{p}}$ für \mathbf{p}_i gewählt und dann beibehalten, so daß das System nur lokal eine Vorzugsrichtung besitzt, aber keine globale Asymmetrie aufweist [34].¹⁰ Für allgemeine Fälle ist die Rekurrenz nur schwer sicherzustellen, da die hierfür aufgestellten Kriterien nur in wenigen Ausnahmen analytisch und sonst schwierig numerisch auszuwerten sind [50, 51].

Die Erweiterung zu übernächsten Nachbarn bringt etliche qualitative Veränderungen mit sich. So ist mit der Anordnung der Gitterpunkte wie in Abb. 2.6 (links) zu sehen, daß dies durchaus als erster Schritt in die zweite Dimension betrachtet werden kann. Diese Darstellung illustriert ebenfalls, daß in einem endlichen System mit stationärer Wahrscheinlichkeitsverteilung Kreisströme auftreten können, detaillierte Balance also i.d.R. verletzt wird. Man kann sich leicht anhand von Abb. 2.6 (rechts) überlegen, daß sich diese Kreisströme durch elementare (konstante) Kreisströme in jeder einzelnen Masche ausdrücken lassen: An jedem Gitterpunkt gilt im stationären Fall die Knotenregel, gemäß der sich zu- und abfließende Wahrscheinlichkeitsmasse ausgleichen müssen, was durch die elementaren Kreisströme offensichtlich symbolisiert wird. Die detaillierte Balance im stationären Fall wurde außerdem in Abschnitt 2.1.3 genutzt, um ein Potential zu definieren, das als Pfad einer diskreten Brownschen Bewegung aufgefaßt werden konnte. Eine solche Darstellung

¹⁰Der Ausschluß einer globalen Vorzugsrichtung (*bias*) im System ist natürlich nicht an die Beschränkung auf zwei Sätze von Übergangswahrscheinlichkeiten und Gleichverteilung gebunden. Eine Konstruktion mit mehr Sätzen von Übergangswahrscheinlichkeiten liefert jedoch keine qualitativen Veränderungen.

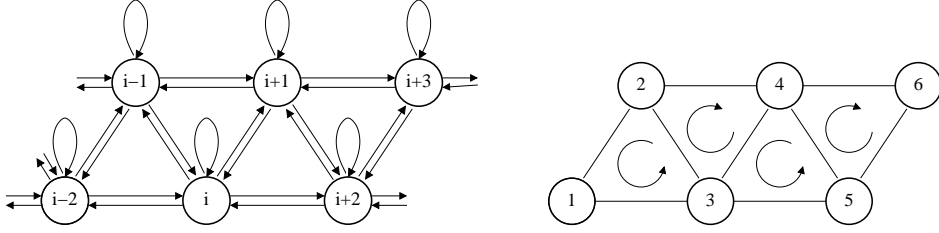


Abbildung 2.6: Links: Anordnung des Übergangsgraphen als Leiter mit dreieckigen Maschen. Die erlaubten Übergänge sind durch Pfeile symbolisiert. Rechts: Durch elementare (konstante) Kreisströme wird im stationären Zustand garantiert, daß sich zu- und abfließende Wahrscheinlichkeitsmasse an jedem Gitterpunkt ausgleichen.

ist nun zumindest i. a. nicht mehr möglich.

2.2.2 Detaillierte Balance

Es lassen sich jedoch auch spezielle Systeme mit Übergängen zu übernächsten Nachbarn konstruieren, die detaillierte Balance im stationären Fall erfüllen. Sie unterscheiden sich damit in diesem Merkmal nicht von der Sinai-Unordnung und dienen in den Kapiteln 4 und 5 als Vergleich zur verallgemeinerten binären Unordnung. Das Verfahren, um detaillierte Balance zu gewährleisten, bedient sich dabei den Regeln der Glauber-Dynamik [52], gemäß der die Übergangswahrscheinlichkeiten aus einem zuvor definierten Potential V_i bestimmt werden.

Gegeben sei eine Kette \mathcal{S} der Länge $L + 1$ wie in Abb. 2.6 (links) beginnend mit dem Gitterpunkt 0 und der stationären Dichte π_i am Ort $i \in \mathcal{S}$. Die Verteilung ist stationär, wenn

$$\pi_i(t+1) - \pi_i(t) \stackrel{(2.14)}{=} \sum_j \pi_j(t) p_{j,i} - \pi_i(t) = \sum_j (\pi_j(t) p_{j,i} - \pi_i(t) p_{i,j}) \quad (2.27)$$

für alle Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ null wird, womit die π_i nicht mehr von der Zeit abhängen. Gleichung (2.27) wird als diskrete Mastergleichung bezeichnet. Detaillierte Balance ist erfüllt, wenn in Gleichung (2.27) alle Elemente $\pi_j p_{j,i} - \pi_i p_{i,j}$ der Summe null sind, was insbesondere die Erfüllung der beiden Bedingungen

$$\pi_i p_{i,i+1} = \pi_{i+1} p_{i+1,i} \quad (2.28)$$

$$\pi_i p_{i,i+2} = \pi_{i+2} p_{i+2,i} \quad (2.29)$$

fordert. Liegt detaillierte Balance vor, so läßt sich die stationäre Verteilung π_i durch ein Zufallspotential V_i

$$\pi_i \equiv \frac{1}{\mathcal{N}} e^{-\theta V_i} \quad \text{Normierung: } \mathcal{N} = \sum_{i=0}^L e^{-\theta V_i} \quad (2.30)$$

darstellen. Analog zum Sinai-Fall sei $\{V_i\}_{i=0}^L$ ein diskreter Brownscher Pfad. V_i kann als Summe von Zufallszahlen r_l geschrieben werden.

$$V_i = \sum_{l=0}^i r_l \quad (2.31)$$

Die Bedingungen (2.28) und (2.29) liefern für die r_i

$$\frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}} = \frac{\pi_{i+1}}{\pi_i} = e^{-\theta(V_{i+1}-V_i)} = e^{-\theta r_{i+1}} \quad (2.32)$$

$$\frac{p_{i,i+2}}{p_{i+2,i}} = \frac{\pi_{i+2}}{\pi_i} = e^{-\theta(V_{i+2}-V_i)} = e^{-\theta r_{i+1}} e^{-\theta r_{i+2}} \quad (2.33)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten selbst werden gemäß der Glauber-Dynamik [52, 53]

$$p_{i,i+1} = \frac{M}{1 + e^{\theta r_{i+1}}} \quad (2.34)$$

$$p_{i+1,i} = \frac{M}{1 + e^{-\theta r_{i+1}}} \quad (2.35)$$

$$p_{i,i+2} = \frac{M}{1 + e^{\theta(r_{i+1}+r_{i+2})}} \quad (2.36)$$

$$p_{i+2,i} = \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_{i+1}+r_{i+2})}} \quad (2.37)$$

bestimmt.¹¹ Mit dieser Wahl für die $p_{i,j}$ sind die Bedingungen (2.32) und (2.33) offenbar erfüllt, und es bleibt zu zeigen, daß sich hiermit auch die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ mit $1 > p_{i,j} \geq 0$ normieren lassen, d.h.

$$1 \stackrel{!}{=} p_{i,i-2} + p_{i,i-1} + p_{i,i} + p_{i,i+1} + p_{i,i+2} \quad (2.38)$$

Mit $M > 0$ sind offenkundig alle $p_{i,i\pm 1}$, $p_{i,i\pm 2}$ größer als null. Für die Normierung (2.38), die mit den Zwischenergebnissen (2.34-2.37) die Form

$$1 - p_{i,i} \stackrel{!}{=} \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_{i-1}+r_i)}} + \frac{M}{1 + e^{-\theta r_i}} + \frac{M}{1 + e^{\theta r_{i+1}}} + \frac{M}{1 + e^{\theta(r_{i+1}+r_{i+2})}} \quad (2.39)$$

annimmt, sind $M = M(\theta)$ und $p_{i,i}$ unter der Bedingung $0 \leq p_{i,i} < 1$ frei wählbar. Die Zahl der Möglichkeiten für die einzelnen Werte der Übergangswahrscheinlichkeiten kann mit der Einschränkung

$$r_i = \begin{cases} +1 & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } \frac{1}{2} \\ -1 & , \text{ mit Wahrscheinlichkeit } \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.40)$$

reduziert werden. Die rechte Seite von Gleichung (2.39) wird für $r_{i+1} = r_{i+2} = -1$ und $r_{i-1} = r_i = 1$ bei $\theta > 0$ bzw. für $r_{i+1} = r_{i+2} = 1$ und $r_{i-1} = r_i = -1$ bei $\theta < 0$ maximal. In beiden Fällen ergibt sich

$$1 - p_{i,i} = \frac{2M}{1 + e^{-2\theta}} + \frac{2M}{1 + e^{-\theta}} = M \left(2 + \tanh \frac{\theta}{2} + \tanh \theta \right) \quad (2.41)$$

Aus $0 < 1 - p_{i,i} \leq 1$ folgt

$$0 < M \leq \frac{1}{2 + \tanh \frac{\theta}{2} + \tanh \theta} \quad , (\theta > -\infty) \quad (2.42)$$

¹¹Die Glauber-Dynamik ist eine Möglichkeit, die Wahrscheinlichkeiten für Spin-Flips im Ising-Spin-Modell zu wählen, um thermische Fluktuationen mathematisch zu beschreiben. Die nach dem Vorfaktor $\theta \propto \frac{1}{k_B T}$ stehenden Ausdrücke im Exponenten der e -Funktion geben in diesem Fall das Potential des lokalen Magnetfelds, verursacht durch die benachbarten Spins und externe Felder, am Ort des Spins an.

2 Modellbeschreibung

Da der $\tanh(x)$ eine monotone Funktion mit $\tanh(\infty) = 1$ und $\tanh(-\infty) = -1$ ist, gilt

$$\frac{1}{4} \leq \frac{1}{2 + \tanh \frac{\theta}{2} + \tanh \theta} \quad (2.43)$$

so daß sich mit $0 < M \leq \frac{1}{4}$ die Übergangswahrscheinlichkeiten immer normieren lassen.

Abschließend ist noch zu überprüfen, wie die Randbedingungen bei einer endlichen Kette bzw. einem Ring beschaffen sein müssen, so daß die detaillierte Balance im stationären Fall nicht verletzt wird. Für reflektierende Randbedingungen ist dies mit

$$p_{0,0} = 1 - \frac{M}{1 + e^{\theta r_1}} - \frac{M}{1 + e^{\theta(r_1+r_2)}} \quad (2.44)$$

$$p_{1,1} = 1 - \frac{M}{1 + e^{\theta r_2}} - \frac{M}{1 + e^{\theta(r_2+r_3)}} - \frac{M}{1 + e^{-\theta r_1}} \quad (2.45)$$

$$p_{L,L} = 1 - \frac{M}{1 + e^{-\theta r_L}} - \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_{L-1}+r_L)}} \quad (2.46)$$

$$p_{L-1,L-1} = 1 - \frac{M}{1 + e^{-\theta r_{L-1}}} - \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_{L-2}+r_{L-1})}} - \frac{M}{1 + e^{\theta r_L}} \quad (2.47)$$

gewährleistet, da die Detaillierte-Balance-Beziehung unabhängig von der Wahl der $p_{i,i}$ ist. Bei periodischen Randbedingungen ist zu beachten, daß $r_L \equiv r_{-1}$, $r_{L+1} \equiv r_0$ und $r_{L+2} \equiv r_1$ gilt:

$$p_{0,L} = \frac{M}{1 + e^{-\theta r_0}} \quad p_{L,0} = \frac{M}{1 + e^{\theta r_0}} \quad (2.48)$$

$$p_{1,L} = \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_1+r_0)}} \quad p_{L,1} = \frac{M}{1 + e^{\theta(r_0+r_1)}} \quad (2.49)$$

$$p_{0,L-1} = \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_0+r_L)}} \quad p_{L-1,0} = \frac{M}{1 + e^{\theta(r_0+r_L)}} \quad (2.50)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeiten werden symmetrisch, d.h. $p_{i,i+2} = p_{i+2,i}$ und $p_{i,i+1} = p_{i+1,i}$, für

$$\frac{M}{1 + e^{\theta(r_{i+1}+r_{i+2})}} = \frac{M}{1 + e^{-\theta(r_{i+1}+r_{i+2})}} \quad (2.51)$$

$$\frac{M}{1 + e^{\theta r_{i+1}}} = \frac{M}{1 + e^{-\theta r_{i+1}}} \quad (2.52)$$

Dies läßt sich nur durch $\theta = 0$ erzwingen. Die verallgemeinerte binäre Unordnung wie in Abschnitt 2.2.1 bzw. Sinai-Unordnung sind hingegen mit dem gewählten Ansatz nicht zu realisieren, da die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}_i = \{p_{i,k}\}_{k=i-2}^{i+2}$ am Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ nun nicht mehr unabhängig von den \mathbf{p}_j der anderen Gitterpunkte $j \in \mathcal{S}$ sind.

3 Mittlere quadratische Versetzung

3.1 Golosov-Phänomen

Neben der anomal langsamen mittleren quadratischen Versetzung ist ein Ensemble von Zufallswanderern in Unordnungsumgebungen vom Sinai-Typ noch durch eine starke Lokalisierung gekennzeichnet, wie Golosov für die halbunendliche Kette gezeigt hat. Mit den Bedingungen wie für Theorem 2.1.2, d.h.

- die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_i = \{p_{i,i-1}, p_{i,i}, p_{i,i+1}\}$$

am Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ sind unabhängig von den anderen \mathbf{p}_j an den Gitterpunkten $j \neq i \in \mathcal{S}$,

- $\overline{\log \frac{p_{i,i-1}}{p_{i,i+1}}} = 0$,
- $\overline{\log^2 \frac{p_{i,i-1}}{p_{i,i+1}}} = \sigma^2 \in (0, \infty)$,

und zusätzlich $\overline{(1 - p_{i,i})^{-1}} < \infty$ und $P(p_{i,i} > 0) > 0$ gilt:

Theorem 3.1.1 (Golosov [39]) *Es gibt einen nur von ω abhängigen Zufallsprozeß $m_t(\omega)$ ($t \in \mathbb{Z}_+$), für den*

- (i) *für jedes $y \in \mathbb{R}$ der Grenzwert*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P([X_t(\omega) - m_t(\omega)] \leq y) = F(y) \quad (3.1)$$

existiert, wobei F eine Verteilungsfunktion ist.

- (ii) *die endlichdimensionale Verteilung des Prozesses $(X_{t+u}(\omega) - m_t(\omega) : u \in \mathbb{Z})$ mit $t \rightarrow \infty$ gegen die eines stationären Zufallsprozesses $(y_u : u \in \mathbb{Z})$ konvergiert. (Für die Bestimmtheit wird $X_t(\omega) = 0$ für $t < 0$ gesetzt.)*

- (iii) *wenn $p_{i,i} \equiv p < 1$ und $\log \frac{p_{i,i-1}}{p_{i,i+1}} = \sigma \xi_i$ mit $\overline{\xi_i} = 0$, $\overline{\xi_i^2} = 1$, $\sigma > 0$, dann gilt*

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} F_\sigma \left(\frac{i}{\sigma^2} \right) = G(i) \quad (3.2)$$

wobei F_σ die korrespondierende Verteilungsfunktion aus (i) und G ebenfalls eine Verteilungsfunktion ist.

Die Aussagen (i) und (ii) des Theorems bedeuten, daß sich ein Zufallswanderer hauptsächlich in einer endlichen Umgebung um $m_t(\omega)$ aufhält, wenn t sehr groß wird. Mit

Aussage (iii) kann die Größe dieser Umgebung zu $\left[\left(\frac{p_{i,i-1}}{p_{i,i+1}} \right)^2 \right]^{-1}$ abgeschätzt werden [39].

Für eine anfänglich geschlossene Gruppe von Zufallswanderern hat dies zur Folge, daß sie sich für alle Zeiten gemeinsam, d.h. mit endlicher Breite $\langle X_t^2(\omega) \rangle - \langle X_t(\omega) \rangle^2$, durch

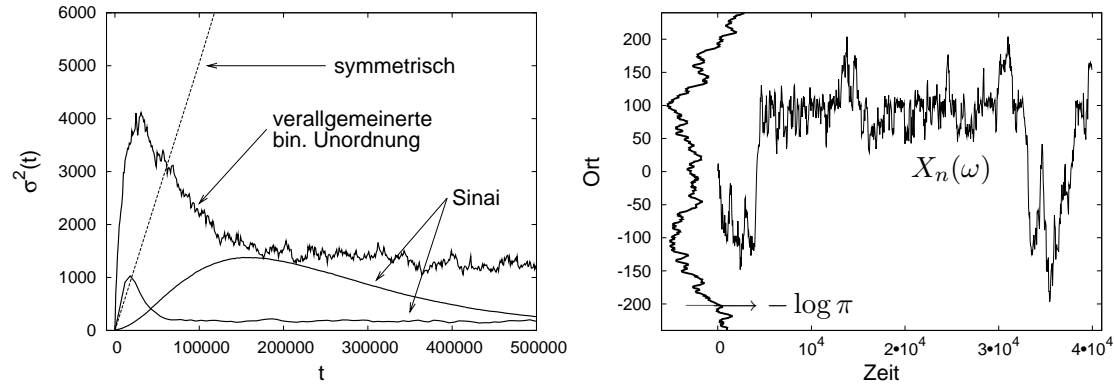


Abbildung 3.1: Links: Dargestellt ist die Varianz $\sigma^2(t) = \langle X_t^2(\omega) \rangle - \langle X_t(\omega) \rangle^2$ der Ortskoordinate einer Gruppe von Zufallswandern in verschiedenen Unordnungsumgebungen ω und in einem geordneten bzw. symmetrischen System. Rechts: Die Grafik zeigt den Pfad $X_n(\omega)$ eines einzelnen Zufallswanderers in einer Umgebung ω mit verallgemeinerter binärer Unordnung. Am linken Rand ist der Ausdruck $(-\log \pi_i)$ als Funktion der Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ aufgetragen, wobei große Werte von $(-\log \pi_i)$ durch große Abszissen gekennzeichnet sind. Es zeigt sich das gleiche Verhalten wie in Abb. 2.4, wo das Potential V_i durch $V_i = -\log \pi_i$ gegeben ist.

die Unordnungslandschaft ω auf der Suche nach tieferen Minima der Potentiallandschaft bewegen. Die Diffusion wird folglich vollständig unterdrückt.

Diese Form der Lokalisierung wurde nicht nur in Unordnungsumgebungen vom Sinai-Typ sondern auch in anderen eindimensionalen [36] und in bestimmten zweidimensionalen flächenerhaltenden Abbildungen [37] beobachtet. Daher ist es nicht überraschend, daß (zumindest numerisch) Systeme mit verallgemeinerter binärer Unordnung ebenfalls das Golosov-Phänomen zeigen, wie Abb. 3.1 (links) verdeutlicht. Das anfängliche Ansteigen und spätere Absinken von $\sigma^2(t)$ läßt sich im Sinai-Fall als Relaxation des Ensembles in das erste lokale Potentialminimum verstehen. Ein solches Aufweiten von $\sigma(t)$ wird in immer größeren Zeitabständen erneut zu beobachten sein, wenn das Ensemble in ein anderes auf der entsprechenden Zeitskala dominierendes Minimum wechselt.

Für die verallgemeinerte binäre Unordnung läßt sich kein zu Gleichung (2.21) analoges Potential V_i definieren, dessen Minima wie im Sinai-Fall die Bewegung bestimmen. Was an die Stelle von V_i treten kann, zeigt Abb. 3.1 (rechts). Dort ist der Pfad eines Zufallswanderers in einem System mit verallgemeinerter binärer Unordnung dargestellt, wobei am linken Rand der Grafik der Logarithmus der stationären Verteilung $(-\log \pi_i)$ zum Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ aufgetragen ist. Für die Sinai-Unordnung ist, bis auf Vorfaktoren, $(-\log \pi_i)$ das Potential V_i aus Gleichung (2.21), durch das sich ein Zufallswanderer auf der Suche nach neuen Minima bewegt. Typischerweise hält sich ein Wanderer in der Nähe eines Potentialminimums um so länger auf, je tiefer es ist. Die Abb. 3.1 (rechts) legt den Schluß nahe, daß $(-\log \pi_i)$ auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung auf diese Art die Bewegung bestimmt.

3.2 Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent α

Aus dem Sinai-Theorem 2.1.2 folgt asymptotisch ($t \rightarrow \infty$) für die mittlere quadratische Versetzung

$$\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle} \propto \log^{2\alpha} t \quad \text{mit } \alpha = 2 \quad (3.3)$$

Der Parameter α wird charakteristischer Exponent genannt. Im folgenden soll numerisch untersucht werden, ob die Beziehung (3.3) auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung gilt und welche Werte α dann annimmt.

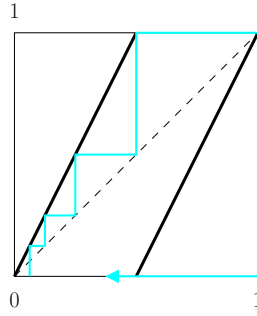


Abbildung 3.2: Die Bernoulli-Abbildung (Bernoulli-Shift) $x_{i+1} = 2x_i \bmod 1$ verschiebt in jedem Schritt eine Zahl um eine Dualstelle nach links. In blau ist der Pfad mit dem Startwert $\frac{1}{16} = 0,0001_{(2)}$ dargestellt, der im vierten Schritt auf die Null abgebildet wird und dort verbleibt.

Um die unordnungsgemittelte mittlere quadratische Versetzung $\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ und daraus den Exponenten α als halben Anstieg der Gerade $\log \overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ über $\log[\log t]$ zu berechnen, sind Mittelungen über das Ensemble von Random walkern (spitze Klammern) und Realisierungen der Unordnungsumgebung (Überstrich) durchzuführen. Das Ensemblemittel $\langle \cdot \rangle$ kann dabei auf zwei unterschiedliche Arten bestimmt werden. Zum einen bietet sich die Simulation einzelner Trajektorien in der iterierten Abbildung $x_{t+1} = f(x_t)$ aus Abschnitt 2.1.2 mit gleichverteilten Startwerten in einer Zelle S_i an, während der andere Weg über die korrespondierenden Übergangsmatrizen \mathbf{P} führt.

Die Simulation einzelner Trajektorien sei zuerst Gegenstand der Betrachtung. Als Ausgangspunkt wird eine konkrete Unordnungsumgebung ω erzeugt¹ und eine Zahl zufälliger, im Intervall $[0, 1)$ gleichverteilter Startpunkte gewählt. Im Prinzip sind damit die einzelnen Trajektorien für alle Zeiten determiniert, so daß keine weiteren Pseudozufallszahlen benötigt werden. Da allerdings numerisch nur rationale Zahlen als Startwerte ausgewählt werden können, d.h. atypische Startwerte,² ergibt sich nicht zwangsläufig das richtige Verhalten. Bei ungünstiger Wahl der Anstiege $f'_{i,j}$ äußert sich dies darin, daß alle Trajektorien irgendwann auf Punkte abgebildet werden, an denen $f(x_t)$ nicht stetig differenzierbar ist. Bekannt ist dieses Verhalten zum Beispiel von der Bernoulli-Abbildung, die alle rationalen Startwerte mit endlicher Binärdarstellung in endlich vielen Schritten auf die Null abbildet, siehe Abb. 3.2. Umgehen läßt sich dies durch Addition einer (kleinen) Zufallszahl in größeren Zeitabständen, was im Prinzip einer nachträglichen genaueren Approximation des Startwertes durch eine rationale Zahl entspricht. Zu beachten ist hierbei allerdings, daß sehr viele Pseudozufallszahlen erzeugt werden müssen. Bei 10^7 -Zeitschritten, 10^4 Zufallswanderern und 10^2 Unordnungsrealisierungen und Anpassung in jedem hundertsten Schritt sind bereits 10^{11} Pseudozufallszahlen erforderlich und damit erheblich mehr, als mit üblichen Standardzufallszahlengeneratoren bedenkenlos erzeugt werden sollten.³ Wird statt der stückweise linearen Abbildung die diskrete Kette \mathcal{S} verwendet, um darauf einzelne Trajektorien zu simulieren, so ist dieser Frage natürlich noch größere Aufmerksamkeit zu schenken.

Wählt man nicht die iterierte Abbildung sondern die Kette \mathcal{S} als Ausgangspunkt, um die

¹Deren Größe kann auch noch im Verlauf der Simulation angepaßt werden, falls die Grenzen erreicht werden sollten.

²Die rationalen Zahlen haben auf dem Einheitsintervall das Maß null.

³Eine Pseudozufallszahlenfolge soll nicht durch einen effizienten (polynomialen) Algorithmus ohne Kenntnis der Berechnungsvorschrift, des Startwertes und der Parameterbelegungen signifikant von einer echten Folge von Zufallszahlen zu unterscheiden sein [54]. Standardgeneratoren nutzen lineare Kongruenzalgorithmen und sind maximal bis 10^6 zuverlässig, in Kombination mit sog. Shuffle-Algorithmen je nach Aufwand bis 10^8 oder auch deutlich höher [55].

3 Mittlere quadratische Versetzung

Größe $\langle X_t^2(\omega) \rangle$ zu bestimmen, empfiehlt sich statt der Simulation einzelner Trajektorien die iterierte Anwendung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten $\pi_i(t)$ auf die Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ wie in Gleichung (2.14). Sei dazu

$$\langle \pi_t | = \sum_{i=1}^L \pi_i(t) \langle i | \quad \text{mit} \quad \langle i | k \rangle = \delta_{ik} \quad (3.4)$$

der aus den $\{\pi_1(t), \pi_2(t), \dots, \pi_L(t)\}$ gebildete Vektor. Die Iterationsgleichung (2.14) hat damit die Form

$$\langle \pi_{t+1} | = \langle \pi_t | \mathbf{P} \quad (3.5)$$

Start mit Gleichverteilung in einer Zelle bedeutet dann, daß alle Komponenten der Startverteilung $\langle \pi_0 |$ mit Ausnahme einer Eins in der Mitte null sind.⁴ Bei der Berechnung kann die Bandstruktur der Matrix \mathbf{P} ausgenutzt werden.⁵

Abwandeln läßt sich die Iteration (3.5) durch Verwendung der Matrixpotenz

$$\langle \pi_t | = \langle \pi_0 | \mathbf{P}^t \quad (3.6)$$

Da auch Ergebnisse bei Zeitschritten t mit $t = 2^j$, $j = 0, 1, 2, \dots$ für die Bestimmung des Exponenten α genügen, läßt sich die Potenzierung erheblich durch die Iteration

$$\mathbf{P}^{2t} = \mathbf{P}^t \cdot \mathbf{P}^t \quad (3.7)$$

verkürzen.⁶ Das Verfahren wird allerdings dadurch begrenzt, daß sich die anfänglich im wesentlichen leere Bandmatrix sehr schnell füllt und damit den vollen Speicherplatz für $L \times L$ Zahlen benötigt.⁷ Überdies ist die Matrix-Matrix-Multiplikation im Aufwand proportional zu L^3 . Infolgedessen muß die Dimension L erheblich kleiner gewählt werden als bei der Matrix-Vektor-Iteration (3.5), was insbesondere dazu führt, daß schneller Wahrscheinlichkeitsmasse die Kette verläßt und somit die Berechnung limitiert. Unordnungsumgebungen mit schwacher lokaler Asymmetrie (und damit nur schwach ausgeprägten lokalen Minima) sind daher für diese Methode ungeeignet, Systeme mit sehr starker Lokalisierung lassen sich hingegen gut untersuchen.

Die auf einem der beiden Wege erhaltenen Werte $\langle X_t^2(\omega) \rangle$ sind anschließend über verschiedene Realisierungen ω der Unordnungsumgebung zu mitteln. Abb. 3.3 (links) zeigt die Ergebnisse für unterschiedliche Zahlen von Realisierungen ω der Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{20}, \frac{1}{20}, \frac{18}{20}\}$. Betrachtet man zunächst die Kurve für eine einzige Realisierung, so ist zu erkennen, daß das Ensemblemittel $\langle X_t^2(\omega) \rangle$ phasen-

⁴Im Gegensatz zur oben beschriebenen Simulation kann die Dimension L der Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ nicht zu späteren Zeitschritten t angepaßt werden. Die Dimension L muß daher schon zu Beginn hinreichend groß gewählt, der Rechenaufwand ist allerdings proportional zu L , und die Iteration (3.5) abgebrochen werden, wenn eine nennenswerte Wahrscheinlichkeitsmasse die Kette verlassen hat (z.B. $1 - \langle \pi_t | \eta \rangle > 10^{-3}$, wenn $|\eta\rangle = \sum_{i=1}^L |i\rangle$ den Vektor bezeichnet, bei dem alle Komponenten eins sind).

⁵Die Sinai-Unordnung erlaubt zusätzlich noch die Symmetrisierung von $\mathbf{P} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{S}$ mit der symmetrischen Tridiagonalmatrix \mathbf{H} , s. Abschnitt 4.3.1, was den Rechenaufwand um etwa ein weiteres Drittel reduziert

$$\underbrace{\langle \pi_{t+1} |}_{\langle v_{t+1} |} \mathbf{S}^{-1} = \underbrace{\langle \pi_t |}_{\langle v_t |} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{H}$$

da die Rücktransformation $\langle v_t | \mathbf{S} = \langle \pi_t |$ nur in großen Abständen durchgeführt werden muß.

⁶Nach der 30. Iteration ist bspw. schon der Zeitschritt $2^{30} \approx 10^9$ erreicht.

⁷Die Sinai-Unordnung erlaubt wiederum die Symmetrisierung von $\mathbf{P} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{S}$ und damit etwa die Halbierung des Rechenaufwands

$$\mathbf{P}^t = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{H}^t \mathbf{S}$$

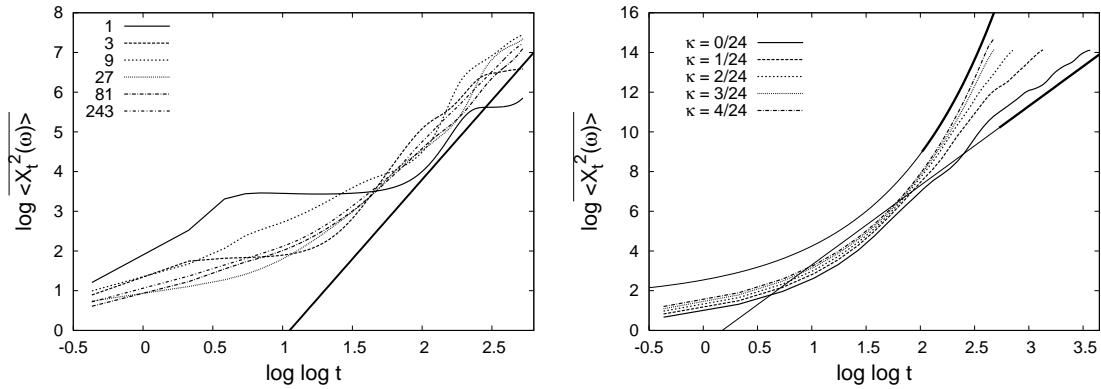


Abbildung 3.3: Links: Die Grafik zeigt, wie sich die mittlere quadratische Versetzung $\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{20}, \frac{1}{20}, \frac{18}{20}\}$ in Abhängigkeit von der Zahl der in die Unordnungsmittelung eingehenden Realisierungen dem asymptotischen Verhalten (3.3) annähert. Das asymptotische Verhalten (3.3) ist durch die Gerade gegeben, die Zahl der Realisierungen ist der Legende zu entnehmen. Rechts: Dargestellt ist die mittlere quadratische Versetzung $\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Die Grenzfälle eines symmetrischen Systems und von Gleichung (3.3) sind als e -Funktion bzw. Gerade gegeben. Für die Berechnung wurde über jeweils 25 Realisierungen der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 8000$, Gleichung (3.7) gemittelt. Zu beachten ist, daß der rechte Rand der Grafik mit $\log \log t = 3.6$ bereits mehr als 10^{15} Zeitschritten entspricht.

weise sehr schnell ansteigt, um anschließend eine lange Zeit nahezu konstant zu bleiben. Dies ist die bereits beim Golosov-Phänomen in Abschnitt 3.1 diskutierte Relaxation der Wahrscheinlichkeitsverteilung in immer tiefere lokale Minima. Jedes dieser auf einer bestimmten Zeitskala dominierenden Minima ist dabei so tief bzw. die Wahrscheinlichkeit zu entkommen so gering, daß sich erst nahezu alle Zufallswanderer darin versammelt haben, ehe es einer nennenswerten Zahl gelingt, in ein noch tieferes lokales Minimum zu entkommen. Die anderen Kurven mit mehr Mittelungen zeigen infolgedessen die Überlagerung dieses Verhaltens. Des weiteren ist der Abb. 3.3 (links) zu entnehmen, das sich trotz der starken lokalen Asymmetrie die Kurven erst nach sehr langer Zeit an die Gerade mit $\alpha = 2$ anschmiegen. Immerhin entspricht der rechte Rand der Grafik bereits $4 \cdot 10^6$ Zeitschritten.

Abb. 3.3 (rechts) zeigt die Größe $\log \overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Der Parameter κ wurde dabei in $\frac{1}{24}$ -Schritten von $\kappa = 0$ bis zu $\kappa = \frac{1}{6}$ variiert, bei dem das System symmetrisch wird. Im symmetrischen Fall gilt $\langle X_t^2 \rangle \propto t$, was einer Exponentialfunktion in der gewählten Darstellung entspricht. Der Vergleich zeigt, daß auch die nicht symmetrischen Systeme anfänglich dieses Verhalten zeigen, ehe sie auf die Gerade, die Gleichung (3.3) mit $\alpha = 2$ repräsentiert, einschwenken. Die Annäherung an (3.3) erfolgt dabei um so zeitiger, je weiter der Parameter κ von $\frac{1}{6}$ entfernt ist.

3.3 Irrfahrt auf einem Streifen

Bolthausen und Goldsheid führten im Jahr 2000 das Modell der zufälligen Irrfahrt in einer Zufallsumgebung auf einem Streifen $\mathbb{S} = \mathbb{Z} \times \{1, \dots, m\}$ der Breite m ein [51]. Die Übergangswahrscheinlichkeiten vom Gitterpunkt $z = (i, n)$, der erste Index bezeichnet die Spalte $i \in \mathbb{Z}$ in Abb. 3.4, der zweite die Zeile $n \in \{1, \dots, m\}$, nach $z' = (i', n')$ sind durch

3 Mittlere quadratische Versetzung

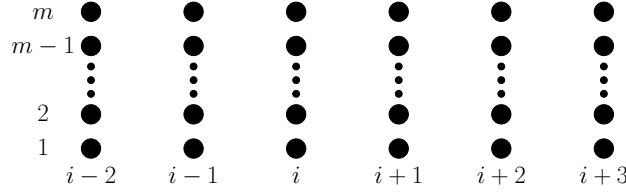


Abbildung 3.4: Auf dem Streifen $\mathbb{S} = \mathbb{Z} \times \{1, \dots, m\}$ sind Sprünge von (i, n) nach allen Punkten $(i \pm 1, \cdot)$ und (i, \cdot) möglich.

die $m \times m$ -Matrizen P_i, Q_i, R_i mit

$$\mathcal{Q}(z, z') = \begin{cases} P_i(n, n') & \text{wenn } z = (i, n), z' = (i + 1, n') \\ Q_i(n, n') & \text{wenn } z = (i, n), z' = (i, n') \\ R_i(n, n') & \text{wenn } z = (i, n), z' = (i - 1, n') \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.8)$$

gegeben. Wenn (P_n, Q_n, R_n) eine unabhängige identisch verteilte Zufallsvariable ist, dann ist durch

$$P_i(n, n') = p_{im+n, (i+1)m+n'-n} \quad (3.9)$$

$$R_i(n, n') = p_{im+n, im+n'-n} \quad (3.10)$$

$$Q_i(n, n') = p_{im+n, (i-1)m+n'-n} \quad (3.11)$$

die Irrfahrt auf einer eindimensionalen Kette \mathcal{S} wie in den vorhergehenden Abschnitten mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{k,l}$ von $k \in \mathcal{S}$ nach $l \in \mathcal{S}$ und Sprüngen um maximal $2m - 1$ Gitterpunkte gegeben [51]. Für eine rekurrente Irrfahrt auf \mathbb{S} konnten Bolthausen und Goldsheid in einer 2008 veröffentlichten Arbeit [56] zeigen, unter welchen Bedingungen sich das Sinai-Verhalten mit $\langle X_t^2(\omega) \rangle \propto \log^4 t$ einstellt, diese schließen die verallgemeinerte binäre Unordnung ein, und daß andernfalls der RWRE ein Martingal ist, dessen asymptotisches Verhalten durch den zentralen Grenzwertsatz gesteuert wird. Bei letzterem Fall konvergiert die Verteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Random walks gegen eine sich mit fortschreitender Zeit verbreitende Gaußverteilung, die sich auch als Ergebnis normaler Diffusion ergibt (siehe Gleichung (1.1)). Die Simulationen in [41], die $\alpha > 2$ in Abhängigkeit von den Systemparametern für die verallgemeinerte binäre Unordnung zeigen, erfassen demnach das asymptotische Verhalten der mittleren quadratischen Versetzung $\langle X_t^2(\omega) \rangle$ nicht korrekt. Über das in Abb. 3.3 (rechts) zu beobachtende präasymptotische Verhalten trifft der Artikel [56] hingegen keine Aussagen.

In [56] können Bolthausen und Goldsheid überdies das zum Sinai-Fall analoge Potential durch ein bestimmtes Produkt von Zufallsmatrizen ausdrücken. Das Potential $V_i^{\mathbb{S}}$ ist dabei als Funktion des Spaltenindex $(i, \cdot) \in \mathbb{S}$ definiert. Sei $\pi(i, n)$ die stationäre Dichte am Punkt $(i, n) \in \mathbb{S}$ und $\pi_i^{\mathbb{S}} = \sum_{n=1}^m \pi(i, n)$ die stationäre Dichte der Spalte i , dann gilt

$$\frac{\pi_k^{\mathbb{S}}}{\pi_l^{\mathbb{S}}} \asymp e^{V_k^{\mathbb{S}} - V_l^{\mathbb{S}}} \quad (3.12)$$

Der Ausdruck $\log \pi_i^{\mathbb{S}}$ weicht also asymptotisch nur bis auf eine additive Konstante begrenzt vom Potential $V_i^{\mathbb{S}}$ ab, was sich damit auch auf die anders definierte Größe $\log \pi_i$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung übertragen läßt.

4 Zustandsdichte der Relaxationsraten

Die Bewegung in den iterierten Abbildungen wird gemäß Kapitel 2 vollständig durch den Frobenius-Perron-Operator \mathcal{P} , Gleichung (2.13), bzw. für eine bezüglich x stückweise konstante Anfangsverteilung $\rho_0(x \in S_i) = \pi_i(0)$ in jeder Einheitszelle S_i durch die Übergangsmatrix \mathbf{P} beschrieben. Damit ist insbesondere die gesamte Information über die Unordnungsumgebung in \mathcal{P} bzw. \mathbf{P} enthalten, weshalb in diesem Kapitel die spektralen Eigenschaften von \mathbf{P} untersucht werden sollen.

Die Zeitentwicklung der Dichteverteilung $\langle \pi_t |$ auf einem abgeschlossenen System \mathcal{S} der Länge L mit der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ und der Startverteilung $\langle \pi_0 |$ ist durch Gleichung (3.6) gegeben. Die spektrale Zerlegung von \mathbf{P}

$$\langle \pi_t | = \langle \pi_0 | \mathbf{P}^t = \langle \pi_0 | \sum_{i=1}^L | \lambda_i \rangle \lambda_i^t \langle \lambda_i | \quad (4.1)$$

zeigt, daß der Zerfall der Anfangsverteilung durch die Eigenwerte λ_i gesteuert wird. Aus dem Perron-Frobenius-Theorem folgt, daß der maximale Eigenwert λ_{max} der stochastischen Zeilenmatrix \mathbf{P} ein einfacher reeller Eigenwert mit dem Wert eins ist. Der Betrag aller anderen Eigenwerte λ_i ist kleiner als λ_{max} , d.h., λ_{max} ist der spektrale Radius $\rho(\mathbf{P})$ und alle anderen λ_i liegen innerhalb des komplexen Einheitskreises [57].¹ Man setzt $\lambda_i = e^{-\epsilon_i}$ und nennt die ϵ_i Relaxationsraten. Der Logarithmus sei dabei so definiert, daß der Realteil aller ϵ_i größer gleich null ist und der Imaginärteil im Intervall $(-\pi, \pi]$ liegt. Die Relaxationsraten ϵ_i bestimmen die Zeitskala, auf der Beiträge zu $\langle \pi_t |$ in Gleichung (4.1) verschwinden, die nicht zum maximalen Eigenwert $\lambda_{max} = 1$ gehören.

Wie schnell sich das System der Gleichgewichtsverteilung $\langle \pi |$ annähert, wird also im Limes großer Zeiten durch die Relaxationsraten ϵ_i mit kleinem Realteil bestimmt. Dies soll am Zerfall eines initialen Delta-Peaks der Dichte an einem beliebigen Gitterpunkt $k \in \mathcal{S}$ verdeutlicht werden (vgl. [34]). Die Startverteilung ist damit durch $\langle \pi_0 | = \langle k |$ gegeben, die Wahrscheinlichkeit zum Zeitpunkt t am Gitterpunkt k zu sein durch $\langle \pi_t | k \rangle = \pi_k(t)$. Die Mittelung über alle Wahrscheinlichkeiten $\pi_k(t)$

$$\frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \pi_k(t) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \langle k | \mathbf{P}^t | k \rangle = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L (\mathbf{P}^t)_{k,k} \quad (4.2)$$

ergibt mit der Spektraldarstellung von \mathbf{P}

$$\frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \pi_k(t) = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \langle k | \left(\sum_{i=1}^L | \lambda_i \rangle e^{-\epsilon_i t} \langle \lambda_i | \right) | k \rangle = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L e^{-\epsilon_i t} \sum_{k=1}^L \langle \lambda_i | k \rangle \langle k | \lambda_i \rangle \quad (4.3)$$

Die Vektoren $\langle k |$, $|k\rangle$ bilden ebenso wie die Vektoren $\langle \lambda_i |$, $|\lambda_i\rangle$ ein vollständiges Biortho-

¹Das Perron-Frobenius-Theorem sichert überdies, daß der zum Eigenwert $\lambda_{max} = 1$ gehörende Linkseigenvektor $\langle \lambda_{max} |$ ebenso wie der zugehörige Rechtseigenvektor nur nichtnegative reelle Einträge besitzt. Der Linkseigenvektor ist also die stationäre Dichte $\langle \pi | = \langle \pi | \mathbf{P}$. Für irreduzible \mathbf{P} gilt $\langle \pi | i \rangle > 0$ für alle $i = 1, \dots, L$, es werden somit keine Teilbereiche der Kette \mathcal{S} entleert.

normalsystem,² woraus

$$\frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \pi_k(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L e^{-\epsilon_i t} \quad (4.4)$$

folgt. Mit der Dichte der Relaxationsraten $\rho(\epsilon) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \delta(\epsilon - \epsilon_i)$ läßt sich dies schließlich

$$\frac{1}{L} \sum_{k=1}^L \pi_k(t) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L e^{-\epsilon_i t} = \int_0^\infty \underbrace{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \delta(\epsilon - \epsilon_i)}_{\rho(\epsilon)} \cdot e^{-\epsilon t} d\epsilon \quad (4.5)$$

als Laplace-Transformierte von $\rho(\epsilon)$ schreiben. Der Zerfall der Wahrscheinlichkeitsmasse in einer Startzelle wird also durch das Verhalten von $\rho(\epsilon)$ an der Stelle gesteuert, bei der ϵ sehr kleine Realteile aufweist.

Abschließend soll noch die integrierte Dichte der Relaxationsraten

$$N(\epsilon) = \int_0^\epsilon \rho(\epsilon') d\epsilon' \quad (4.6)$$

definiert werden, deren Verhalten für kleine ϵ in den nächsten Abschnitten untersucht wird.

4.1 Spektrum der Übergangsmatrizen

Zunächst soll jedoch das Spektrum $\sigma(\mathbf{P}) = \{\lambda_i\}_{i=1}^L$ der Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ von Systemen mit Sinai-Unordnung betrachtet werden, das in Abb. 4.1 für unterschiedliche Parametersätze $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$ dargestellt ist. Die Eigenwerte λ_i sind dabei der Größe nach geordnet, und es ist zu sehen, daß sich die Eigenwerte λ_i unabhängig von der Wahl der Parameter a und b in der Nähe der Eins häufen. Sie liegen also sehr dicht in dem Bereich, der die Relaxation bestimmt.

Änderungen im Parametersatz \mathbf{p} haben nur Einfluß auf den unteren Bereich des Spektrums. In der linken Grafik von Abb. 4.1 wurde bei festem Parameter a die Wahrscheinlichkeit $b = p_{i,i}$ am Ort zu bleiben variiert. Es ist zu erkennen, daß mit steigendem Wert von b der kleinste Eigenwert $\min_i \{\lambda_i\}$ zunimmt. Die rechte Grafik von Abb. 4.1 zeigt die Änderung des Spektrums, wenn der Parameter a bei festem b variiert wird. Dieser Darstellung ist zu entnehmen, daß umso deutlichere Sprünge im Spektrum auftreten, je ausgeprägter die lokale Asymmetrie ist.³ Das Minimum des Spektrums $\min_i \{\lambda_i\}$ bleibt hingegen unbeeinflusst.⁴ Die Eigenwerte einer Matrix \mathbf{P} mit Sinai-Unordnung sind alle reell, da die Matrix \mathbf{P} mit einer Ähnlichkeitstransformation auf reelle symmetrische Tridiagonalgestalt transformiert werden kann,⁵ siehe Abschnitt 4.3.1.

Die Spektren $\sigma(\mathbf{P})$ verschiedener Matrizen \mathbf{P} mit verallgemeinerter binärer Unordnung zeigt Abb. 4.2. Im allgemeinen sind die Eigenwerte pentadiagonaler stochastischer Matri-

²Die Vektorräume $\{|\langle k|\rangle\}_{i=1}^L$ und $\{|k\rangle\}_{i=1}^L$ und die Vektorräume $\{|\lambda_i\rangle\}_{i=1}^L$ und $\{|\lambda_i(0)\rangle\}_{i=1}^L$ sind dual.

³Mit lokaler Asymmetrie ist die Ausprägung einer Vorzugsrichtung am Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ gemeint.

⁴Die stochastische Matrix \mathbf{P} mit $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$ hat nur einen Gerschgorin-Kreis $\bar{S}(b, 1 - b)$ um b mit Radius $1 - b$ in der komplexen Ebene, in dem folglich alle Eigenwerte liegen [57]. Mit wachsendem b wird also das Intervall $[2b - 1, 1] \in \mathbb{R}$ immer kleiner, in dem sich Eigenwerte befinden können, während der Parameter a hierauf keinen Einfluß hat.

⁵Daß die Eigenwerte a_i jeder reellen symmetrischen Matrix \mathbf{A} reell sind, folgt aus den Eigenschaften des Skalarprodukts. Sei $A |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle$, $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}$ und A^+ der adjungierte Operator zu A . Wegen $A^+ = A$ gilt

$$a_i = \langle a_i | A a_i \rangle = \langle A^+ a_i | a_i \rangle = \langle a_i | A^+ a_i \rangle^* = a_i^*$$

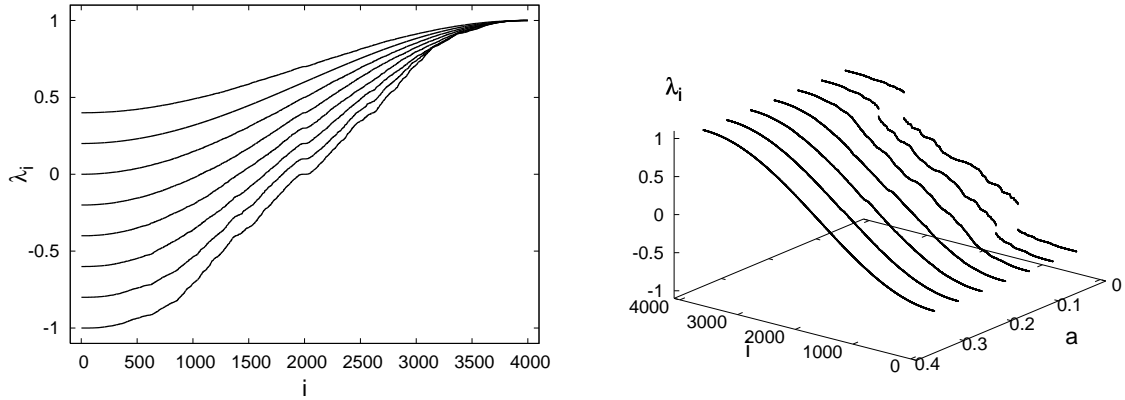


Abbildung 4.1: Die Grafiken zeigen die der Größe nach geordneten Eigenwerte λ_i von Übergangsmatrizen \mathbf{P} mit Sinai-Unordnung für unterschiedliche Parametersätze \mathbf{p} . Unabhängig von \mathbf{p} zeigen alle Spektren $\sigma(\mathbf{P})$ eine Häufung der Eigenwerte bei Eins, Änderungen in \mathbf{p} beeinflussen nur den unteren Teil des Spektrums. In der linken Grafik sind die Eigenwerte λ_i für die Parametersätze $\mathbf{p} = \{\frac{1}{5}, b, \frac{4}{5} - b\}$, $b = \frac{0}{10}, \frac{1}{10}, \dots, \frac{4}{10}$ dargestellt. Mit wachsendem b wird $\min_i \{\lambda_i\}$ kleiner. Rechts wurde b bei $b = \frac{1}{5}$ fixiert und stattdessen die lokale Asymmetrie variiert: $\mathbf{p} = \{a, \frac{1}{5}, \frac{4}{5} - a\}$, $a = \frac{1}{20}, \frac{2}{20}, \dots, \frac{7}{20}$.

zen nicht alle reell, eine Ähnlichkeitstransformation auf eine reelle symmetrische Matrix ist somit nicht möglich. Der Grafik ist jedoch zu entnehmen, daß alle Eigenwerte mit großen Realteilen reell sind, also jene Eigenwerte, die die Relaxation bestimmen. Überdies liegen die Eigenwerte wie bei der Sinai-Unordnung sehr dicht bei $\text{Re}[\lambda_i] = 1$.

Die Häufung der Eigenwerte in der Nähe der Eins führt zu einer Singularität in der integrierten Zustandsdichte der Relaxationsraten $N(\epsilon)$, die in den nächsten Abschnitten dieses Kapitels genauer untersucht werden soll.

4.2 Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent δ

Für einen exakt lösbaren kontinuierlichen RWRE mit derselben Asymptotik wie ein System mit der Langevin-Gleichung (2.17) wurde für $\epsilon \rightarrow 0$ gezeigt, daß

$$\rho(\epsilon) = \frac{d}{d\epsilon} \frac{2}{\log^2 \epsilon} = -\frac{4}{\epsilon \log^3 \epsilon} \quad (4.7)$$

gilt [58], woraus mit Gleichung (4.6)

$$N(\epsilon) = \frac{c}{|\log \epsilon|^\delta} \quad \text{mit } c = 2 \text{ und } \delta = 2 \quad (4.8)$$

folgt. In [34] wurde gezeigt, daß Gleichung (4.8) auch für die Sinai-Unordnung sehr gut das Verhalten für kleine ϵ beschreibt, was impliziert, daß das Sinai-Modell und das Kontinuumsmodell aus [58] zur gleichen Universalitätsklasse gehören. Das Langzeitverhalten von $\frac{1}{L} \sum_{k=0}^L \pi_k(t)$ ist damit bei Anwendung eines Tauberschen Theorems auf Gleichung (4.5) als proportional zu $2 \log^{-2} t$ gegeben [34]. Die Eigenschaften der Unordnungsumgebung führen andererseits dazu, daß die mittlere Rückkehrwahrscheinlichkeit selbstmittelnd für große L ist, weshalb mit Gleichung (4.2)

$$\frac{1}{L} \sum_{k=0}^L \pi_k(t) = \overline{\pi_k(t)} = \overline{(\mathbf{P}^t)_{k,k}} \quad (4.9)$$

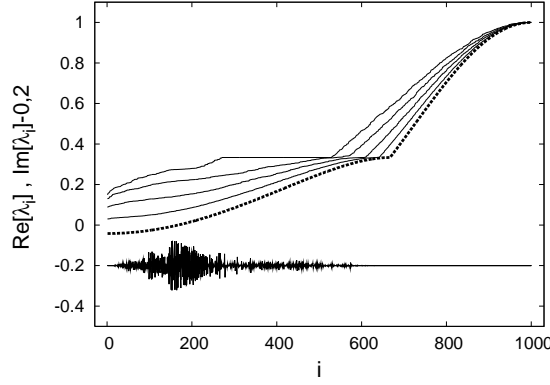


Abbildung 4.2: Spektrum $\sigma(\mathbf{P})$ für verschiedene Übergangsmatrizen \mathbf{P} mit verallgemeinerter binärer Unordnung und den Parametern $\mathbf{p} = \{a, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - a, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ und $a = \frac{0}{24}, \frac{1}{24}, \dots, \frac{4}{24}$. Oben in der Grafik sind die Realteile $\text{Re}[\lambda_i]$ und unten die Imaginärteile $\text{Im}[\lambda_i] - 0.2$ der Eigenwerte λ_i aufgetragen. Der symmetrische Fall mit $a = \frac{1}{6}$ ist als gestrichelte Linie dargestellt. Mit fallendem a wird $\min_i \{\text{Re}[\lambda_i]\}$ immer größer. Die Eigenwerte oberhalb des Knicks im reellen Spektrum sind reell.

folgt. Für $\overline{\mathbf{P}_{k,l}^t}$ wird allgemein das Skalenverhalten $\overline{\mathbf{P}_{k,l}^t} = \frac{1}{y(t)} g\left(\frac{x}{y(t)}\right)$ mit $x = |k - l|$ angenommen [59, 60], woraus sich bei $x = 0$ und damit $g(0) = \text{const.}$ bezüglich t

$$\frac{2}{\log^2 t} \propto \frac{1}{y(t)} g(0) \rightarrow y(t) \propto \log^2 t \quad (4.10)$$

ergibt. Mit \mathbf{P}^t kann aber auch die unordnungsgemittelte mittlere quadratische Versetzung berechnet werden

$$\overline{\langle x^2(t) \rangle} = \overline{\sum_k k^2 \mathbf{P}_{0,k}^t} \rightarrow 2 \int_0^\infty \frac{x^2}{\log^2 t} g\left(\frac{x}{\log^2 t}\right) dx \quad (4.11)$$

was mit der Substitution $z(t) = \frac{x}{\log^2 t}$ auf

$$\overline{\langle x^2(t) \rangle} = 2 \log^4 t \int_0^\infty z^2 g(z) dz \propto \log^4 t \quad (4.12)$$

führt, da das Integral nicht mehr von der Zeit t abhängt. Für die Sinai-Unordnung fallen also die Exponenten mit $\alpha = \delta = 2$ zusammen. Dies ist insofern bemerkenswert, als Gleichgewichtseigenschaften großer aber endlicher Systeme (δ) mit Nichtgleichgewichtseigenschaften unendlicher Systeme (α) verknüpft werden. Im Gegensatz hierzu sind Abbildungen mit normaler Diffusion durch $\frac{1}{L} \sum_{k=0}^L \pi_k(t) \propto 1/\sqrt{t}$ und $N(\epsilon) \propto \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$ gekennzeichnet [34].

4.3 Numerische Bestimmung des Exponenten δ

Wie sich die integrierte Zustandsdichte der Relaxationsraten $N(\epsilon)$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung verhält, soll in diesem Abschnitt numerisch untersucht werden. Die Sinai-Unordnung mit dem bekannten Ergebnis $\delta = 2$ dient dabei als Testfall. Um $N(\epsilon)$ vollständig zu bestimmen, ist die Auswertung des kompletten Spektrums der Übergangsmatrix \mathbf{P} erforderlich, was in Abschnitt 4.3.1 diskutiert wird. Für das asymptotische Verhalten bei $\epsilon \rightarrow 0$ ist allerdings nur der maximale Teil des Spektrums $\sigma(\mathbf{P})$ interessant. Ein Verfahren, wie lediglich dieser Bereich untersucht werden kann, wird in Abschnitt 4.3.2

vorgestellt.

4.3.1 Vollständige Berechnung des Spektrums

Symmetrisierung Die Bestimmung der Relaxationsraten durch Diagonalisieren der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ ist zumindest für die Sinai-Unordnung auch für große L mit überschaubarem Rechenaufwand möglich. Hierbei läßt sich ausnutzen, daß Matrizen mit Sinai-Unordnung durch eine Ähnlichkeitstransformation $\mathbf{P} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{S}$ auf symmetrische Tridiagonalgestalt \mathbf{H} umgeschrieben werden können [34], was die Verwendung schneller Algorithmen gestattet.⁶ Eine Ähnlichkeitstransformation läßt die Eigenwerte unverändert.

Die symmetrische Matrix \mathbf{H} ist dabei durch

$$(\mathbf{H})_{i,i+1} = (\mathbf{H})_{i+1,i} = \sqrt{p_{i,i+1}p_{i+1,i}}, \quad (\mathbf{H})_{i,i} = p_{i,i} \quad (4.13)$$

gegeben, und die Transformationsmatrix \mathbf{S} hat Diagonalgestalt

$$(\mathbf{S})_{i,j} = s_i \delta_{ij} \quad \text{mit} \quad s_{i+1} = s_i \sqrt{\frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}}} \quad (4.14)$$

wodurch sich die Zahl der Nebendiagonalen bei Anwendung von \mathbf{S} auf eine Matrix nicht ändert. Offenbar beeinflußt die Transformation $\mathbf{S} \mathbf{P} \mathbf{S}^{-1}$ nicht die Elemente auf der Hauptdiagonale von \mathbf{P} , so daß nur die Nebendiagonalelemente zu überprüfen sind. Für die rechte Nebendiagonale $(\mathbf{P})_{i,i+1} = p_{i,i+1}$ folgt:

$$p_{i,i+1} \stackrel{!}{=} (\mathbf{S}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{S})_{i,i+1} = \sum_{k,l} (\mathbf{S}^{-1})_{i,k} (\mathbf{H})_{k,l} \mathbf{S}_{l,i+1} \quad (4.15)$$

$$\stackrel{(4.14)}{=} s_i^{-1} \delta_{i,k} (\mathbf{H})_{k,l} s_l \delta_{l,i+1} \quad (4.16)$$

$$= \sqrt{\prod_{k=1}^{i-1} \frac{p_{k+1,k}}{p_{k,k+1}}} \sqrt{p_{i,i+1}p_{i+1,i}} \sqrt{\prod_{k=1}^i \frac{p_{k,k+1}}{p_{k+1,k}}} \quad (4.17)$$

$$= \sqrt{\frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}}} \sqrt{p_{i,i+1}p_{i+1,i}} = p_{i,i+1} \quad (4.18)$$

Die Rechnung für die linke Nebendiagonale ist analog.

Selbstmittelung Für die Berechnung des Exponenten δ ist ferner wichtig, daß die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ eine selbstmittelnde Größe ist. Dies folgt aus der Selbstmittelungseigenschaft der Zustandsdichte des ungeordneten Schrödinger-Operators [61], worauf die Sinai-Unordnung mit der Transformation auf Tridiagonalgestalt exakt abgebildet werden kann [34]. Bereits für eine einzige Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ nimmt $N(\epsilon)$ für $L \rightarrow \infty$ die richtige Form an, eine Mittelung über verschiedene Unordnungsrealisierungen ist nicht notwendig. Sowohl aus Gründen der Genauigkeit der Gleitkommazahldarstellung als auch des Rechenaufwandes bleibt die Bestimmung von $N(\epsilon)$ allerdings auf Systemgrößen L bis zur Größenordnung 10^3 beschränkt. Die Selbstmittelung läßt sich numerisch dennoch nutzen, da sich die Relaxationsraten verschiedener Realisierungen von \mathbf{P} zu einer integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ zusammenfassen lassen. Hierfür sind Z Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ zu erzeugen, jeweils die L Relaxationsraten zu berechnen und anschließend alle $Z \cdot L$ Relaxationsraten zu sortieren. Wie die Wahl von Z und L das Ergebnis beeinflußt, ist in Abb. 4.3 dargestellt. Die linke Grafik zeigt elf Verläufe mit unterschiedlichen Z ,

⁶In Lapack ist dies zum Beispiel die Routine DSBEV.

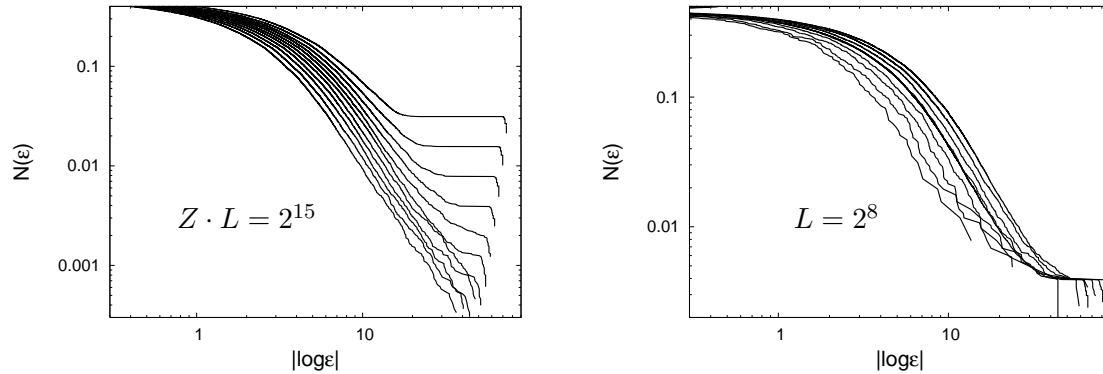


Abbildung 4.3: Selbstmittelung der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten ϵ für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{2}{10}, \frac{3}{10}, \frac{5}{10}\}$: Links wurde das Produkt aus der Zahl der Realisierungen Z und der Größe L der Unordnungsumgebung konstant $ZL = 2^{15}$ gehalten. Z variiert von links nach rechts mit $Z = 2^0, 2^1, \dots, 2^{10}$ und L entsprechend von $L = 2^{15}, 2^{14}, \dots, 2^0$. In der rechten Grafik ist $L = \text{const}$ und die Zahl der Realisierungen steigt von links nach rechts mit $Z = 2^0, 2^1, \dots, 2^7$. Für die Darstellung wurden die Kurven auf der $|\log \epsilon|$ -Achse gegeneinander verschoben, normalerweise sind sie für kleine Werte von $|\log \epsilon|$ deckungsgleich. Bei kleinen Systemgrößen L kann folglich unabhängig von der Wahl von Z das asymptotische Verhalten von $N(\epsilon)$ nicht richtig erfaßt werden. Mit wachsendem Z wird hingegen der Verlauf von $N(\epsilon)$ glatter.

bei denen das Produkt $Z \cdot L$ konstant gehalten wurde. Dieser Darstellung ist insbesondere zu entnehmen, daß für kleinere Systemgrößen L die integrierte Zustandsdichte früher abknickt. Das asymptotische Verhalten kann hier nicht richtig erfaßt werden. Die rechte Grafik von Abb. 4.3 unterstreicht bei konstantem L für unterschiedliche Z die Mittelungseigenschaft: Die Kurven werden mit wachsendem Z glatter.

Numerische Ergebnisse Die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ einer einzigen Realisierung $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ einer Kette \mathcal{S} mit Sinai-Unordnung zeigt Abb. 4.4. Die Dimension L der Übergangsmatrix \mathbf{P} ist mit $L = 20000$ dabei so groß, daß 20 Eigenwerte größer als $1 - 10^{-16}$ sind.⁷ Aufgrund der Maschinengenauigkeit werden diese zu eins gerundet und können damit nicht ausgewertet werden. Bis $|\log \epsilon| \approx 20$ liegen die Relaxationsraten ϵ dicht genug, um den Exponenten δ über den Anstieg in der gewählten Darstellung zu ermitteln. Er weicht nur geringfügig vom analytischen Ergebnis $\delta = 2$ ab.

Einen Überblick, welche Ergebnisse für den Exponenten δ dieses Vorgehen bei Variation der Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$ liefert, gibt Abb. 4.5. Der Grafik ist zu entnehmen, daß der Exponent δ zu groß bestimmt wird, wenn a gegen $\frac{1-b}{2}$ geht. Bei $a = \frac{1-b}{2}$ werden die Übergangswahrscheinlichkeiten symmetrisch, womit nicht die Beziehung (4.8) sondern $N(\epsilon) \propto \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$ gilt [34]. Was bei Annäherung an den symmetrischen Fall mit der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ passiert, untersucht Abb. 4.6 genauer für deutlich größere Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$, so daß nun bis $|\log \epsilon| \approx 30$ die Relaxationsraten ϵ dicht genug für die Bestimmung des Exponenten δ liegen. Allen drei Grafiken, die sich von links nach rechts dem symmetrischen Fall $\mathbf{p} = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\}$ nähern, ist eine Änderung des Anstiegs der integrierten Zustandsdichte und damit des Exponenten δ bei $|\log \epsilon| \gtrsim 20$ gemein, und zwar um so ausgeprägter, je näher sich das System am symmetrischen Fall befindet. Den Exponenten δ richtig zu bestimmen, erfordert also bei Annäherung an den

⁷Dies ist nicht durch die einfache Transformation $\mathbf{P} - \mathbf{I}$ zu beheben, bei der alle Eigenwerte von \mathbf{P} um -1 verschoben werden. Die für die Transformation auf Dreiecksgestalt von \mathbf{P} notwendigen Ähnlichkeitstransformationen beinhalten Additionen von (Vielfachen) von Elementen von \mathbf{P} [55], die Fehler entsprechend der Maschinengenauigkeit aufweisen.

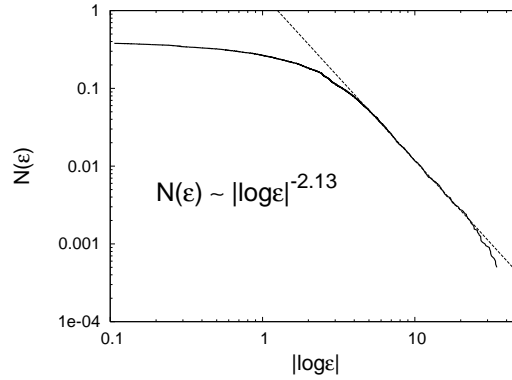


Abbildung 4.4: Die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten $\epsilon < 1$ für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{2}{10}, \frac{1}{10}, \frac{7}{10}\}$ ist als Verbindungslinie der (diskreten) Ergebnisse dargestellt. Zu beachten ist daher, daß das rechte Ende der Kurve nur von wenigen Datenpunkten gebildet wird und damit für die Auswertung ungeeignet ist. Die Maschinengenauigkeit wird etwa bei $|\log \epsilon| \approx 30$ erreicht. Der Exponent δ wird als Anstieg bei kleinen $N(\epsilon)$ aus den Daten zu $\delta = 2.13$ bestimmt (gerade Linie).

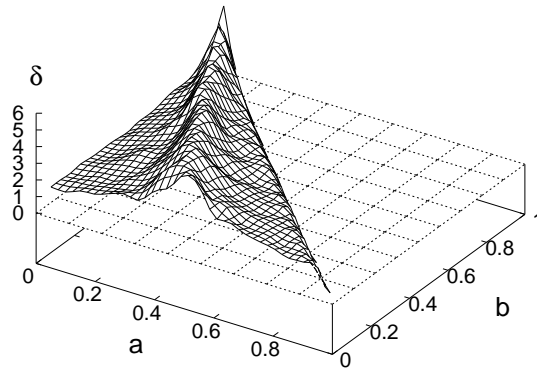


Abbildung 4.5: Übersicht über die Ergebnisse bei numerischer Bestimmung des Exponenten δ für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$. Das Vorgehen für jeden einzelnen Wert δ entspricht dem von Abb.4.4.

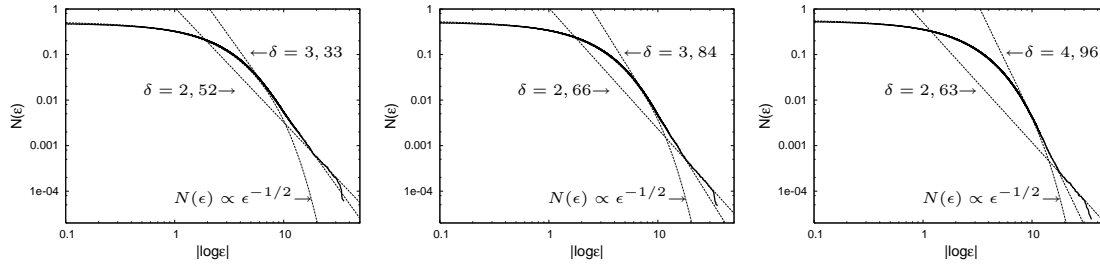


Abbildung 4.6: Die Bilder zeigen die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten $\epsilon < 1$ von links nach rechts für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{5}{20}, \frac{7}{20}, \frac{8}{20}\}$, $\mathbf{p} = \{\frac{5}{20}, \frac{8}{20}, \frac{7}{20}\}$ und $\mathbf{p} = \{\frac{5}{20}, \frac{9}{20}, \frac{6}{20}\}$. Die Grafiken nähern sich damit dem symmetrischen Fall bei $\mathbf{p} = \{\frac{5}{20}, \frac{10}{20}, \frac{5}{20}\}$. Wie in Abb. 4.4 wurde sich jeweils auf eine Realisierung der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ beschränkt und nun für unterschiedliche Bereiche von $N(\epsilon)$ der Exponent δ gemäß $N(\epsilon) \propto |\log \epsilon|^\delta$ bestimmt. Die zugehörigen Regressionen sind als Geraden in der doppellogarithmischen Darstellung gegeben, wobei die jeweils steilere (größeres δ) das in Abb.4.5 eingegangene Ergebnis zeigt. Die flachere zeigt jeweils die Regression für größere $|\log \epsilon|$. Dies ist hier möglich, da die Systeme mit $L = 250000$ beträchtlich größer sind als in Abb.4.5, so daß für die Bestimmung des Exponenten δ die Punkte bis $|\log \epsilon| \approx 30$ dicht genug liegen. Der Bereich kleiner Werte von $|\log \epsilon|$ wird sehr gut durch $N(\epsilon) \propto \frac{1}{\sqrt{\epsilon}}$, das Verhalten im symmetrischen Fall, beschrieben.

symmetrischen Fall sehr große Übergangsmatrizen.

Verallgemeinerte binäre Unordnung Die verallgemeinerte binäre Unordnung kann, aufgrund des Fehlens von detaillierter Balance im stationären Zustand, nicht auf den ungeordneten Schrödinger Operator abgebildet werden. Die Selbstmittelung der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ ist dennoch gewährleistet. Allgemeine Grundlage für die Selbstmittelung ist zunächst die räumliche Homogenität im Unordnungsmittel und in deren Folge die räumliche Ergodizität. Eine zweite Forderung ist der Zerfall der Korrelationen zwischen den die Umgebung definierenden Variablen [61]. Da die Unordnungsumgebung aus identisch und gleichverteilten Zufallsvariablen konstruiert wird, sind beide Bedingungen trivialerweise erfüllt, und alle extensiven Größen sind dann nach entsprechender Normierung selbstmittelnd.

Das Fehlen einer Transformation der Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ von Systemen mit verallgemeinerter binärer Unordnung auf symmetrische Tridiagonalgestalt führt jedoch zu einem erheblich höheren Rechenaufwand für die Eigenwertbestimmung als bei der Sinai-Unordnung.⁸ In Folge dessen muß die Bestimmung der Relaxationsraten auf deutlich kleinere Übergangsmatrizen als bei der Sinai-Unordnung beschränkt bleiben, was für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ untersucht werden soll. In Abb. 4.7 ist beispielhaft die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ für $\kappa = \frac{1}{12}, \frac{3}{12}, \frac{5}{12}$ gegeben. Wie bereits bei Abb.4.4 diskutiert, wird das rechte Ende der Kurve nur von sehr wenigen Datenpunkten gebildet und ist daher nicht von Belang. Ab etwa $|\log \epsilon| < 12$ liegen jedoch die Punkte dicht genug für die Regression. Die Grafiken zeigen auf, daß sich $N(\epsilon)$ für große $|\log \epsilon|$ nach dem Potenzgesetz (4.8) mit von $\delta = 2$ abweichendem charakteristischen Exponenten δ verhält. Offen bleibt durch die rechentechnische Beschränkung auf kleine L die Frage, ob es sich hierbei um das korrekte asymptotische Verhalten der integrierten Zustandsdichte handelt oder lediglich um präasymptotisches Verhalten, wie schon die Diskussion für die Sinai-Unordnung bei Annäherung an den symmetrischen Fall gezeigt hat (vgl. Abb.4.6).

Einen systematischen Überblick über die wie bei Abb. 4.7 numerisch bestimmten Expo-

⁸Die Lapackroutine für symmetrische Tridiagonalmatrizen DSBEV verlangt nur die Speicherung der von Null verschiedenen Einträge, die allgemeine Routine DGEEV hingegen speichert die volle Matrix. Der Speicherbedarf für eine $10^3 \times 10^3$ -Matrix in 64-bit-Darstellung liegt bereits bei knapp 8 MB und der Rechenaufwand steigt $\propto L^3$ (bei DSBEV $\propto L^2$)

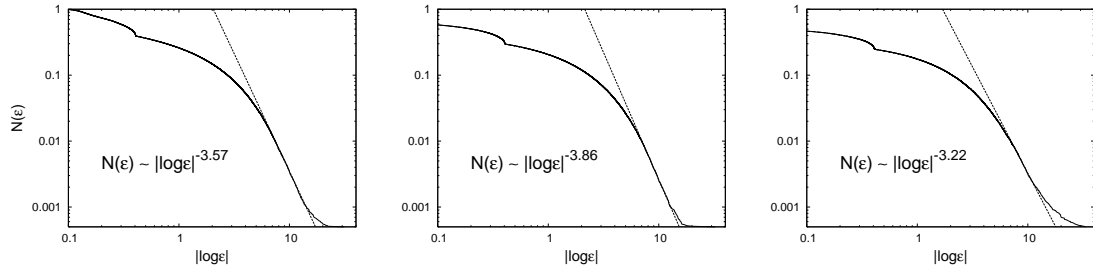


Abbildung 4.7: Dargestellt ist jeweils die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten $\epsilon < 1$ für Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit den Parametern $\mathbf{p} = \{\frac{1}{12}, \frac{1}{6}, \frac{5}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$, $\mathbf{p} = \{\frac{3}{12}, \frac{1}{6}, \frac{3}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ und $\mathbf{p} = \{\frac{5}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ (von links nach rechts). Es wurden je $Z = 50$ Realisierungen von \mathbf{P} mit $L = 2000$ ausgewertet und für die Bestimmung des Exponenten δ wie in Abb. 4.4 verfahren.

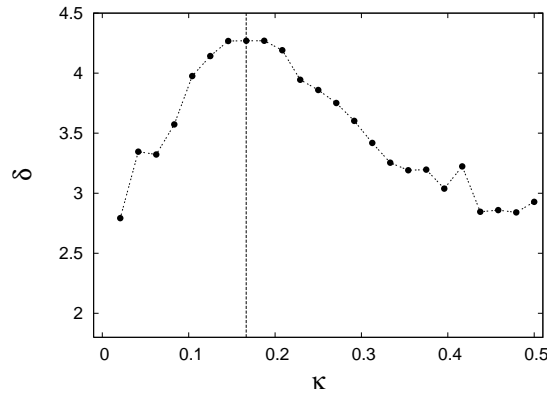


Abbildung 4.8: Charakteristischer Exponent δ für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Der jeweils wie bei Abb. 4.7 bestimmte Exponent δ weicht mit Annäherung an den symmetrischen Fall bei $\kappa = \frac{1}{6}$ (vertikale Linie) immer deutlicher vom asymptotischen Verhalten der Sinai-Unordnung mit $\delta = \frac{1}{2}$ ab.

nenten δ für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ gibt Abb. 4.8. Die Werte für δ liegen deutlich über dem Ergebnis $\delta = 2$ der Sinai-Unordnung und werden mit Annäherung an den symmetrischen Fall bei $\kappa = \frac{1}{6}$ größer, was auch bei der Sinai Unordnung in Abb. 4.5 beobachtet wurde.

Detaillierte Balance Bevor im nächsten Abschnitt ein Verfahren vorgestellt wird, wie näherungsweise der für das asymptotische Verhalten der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ maßgebliche Bereich des Spektrums der Übergangsmatrix $\mathbf{P}^{L \times L}$ bestimmt werden kann, soll abschließend das Modell aus Abschnitt 2.2.2 betrachtet werden, bei dem Übergänge zu den übernächsten Nachbarn erlaubt sind und detaillierte Balance im stationären Zustand erfüllt ist. Die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ hängen in diesem Fall von den beiden Parametern θ und M ab, wobei $p_{i,j} = p_{j,i}$ bei $\theta = 0$ gilt. Für einen festen Wert von M zeigt Abb. 4.9 (links) die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ für verschiedene Werte von θ . Wie bei der Sinai-Unordnung ist bereits bei relativ kleinen Dimensionen L das Verhalten (4.8) zu beobachten, wenn das System nicht zu nahe am symmetrischen Fall ist, also θ sehr klein wird. Von dem Parameter M hängt der numerisch bestimmte Exponent δ hingegen nicht ab, wie 4.9 (links) verdeutlicht.

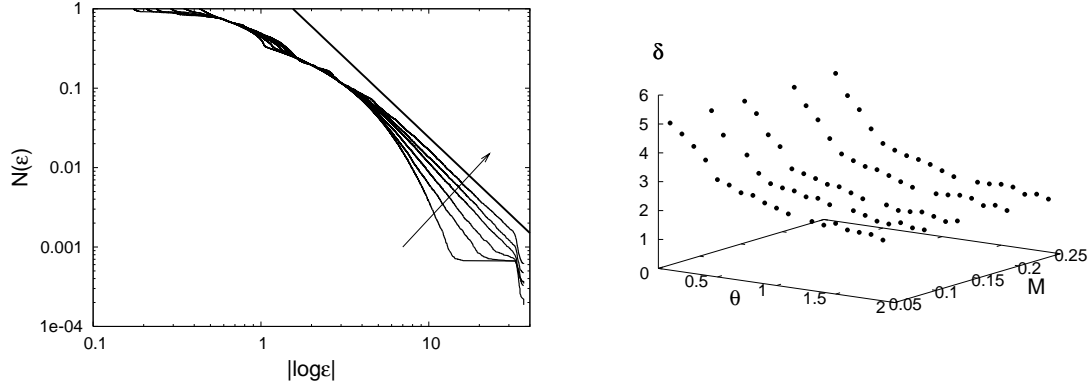


Abbildung 4.9: In der linken Grafik wurde die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ für das System aus Abschnitt 2.2.2 bei $M = 0.15$ ermittelt. Der zweite, die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ bestimmende Parameter θ ist in Pfeilrichtung $\theta = 0.2, 0.5, \dots, 1.7$. Mit wachsendem θ zeigen die Kurven immer besser das als Gerade dargestellte asymptotische Verhalten (4.8) der Sinai-Unordnung. Von M hängen die numerischen Ergebnisse für den Exponenten δ hingegen nicht ab, wie die rechte Grafik zeigt. Beiden Abbildungen liegen für jeden Parametersatz (M, θ) 100 Realisierungen der Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 1500$ zugrunde.

4.3.2 Näherungslösung mit Greenscher Funktion

Die Bestimmung der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten ϵ durch vollständige Auswertung des Spektrums der Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mußte für die verallgemeinerte binäre Unordnung im vorigen Abschnitt auf kleine Systemgrößen L beschränkt bleiben. In Folge dessen war unklar, ob das asymptotische Verhalten richtig erfaßt wurde. Für das asymptotische Verhalten ist jedoch gar nicht das volle Spektrum von Belang sondern nur dessen maximaler Teil. In diesem Abschnitt soll ein Verfahren vorgestellt werden, das mit Hilfe der Greenschen Funktion den maximalen Teil des Spektrums der Matrix \mathbf{P} bestimmt.

Dazu seien die Eigenwerte und Eigenfunktionen von \mathbf{P} durch

$$\mathbf{P} | \lambda_n \rangle = \lambda_n | \lambda_n \rangle \quad (4.19)$$

gegeben, wobei die Eigenvektoren, gesichert durch die Irreduzibilität von \mathbf{P} , ein vollständiges Biorthonormalsystem bilden, d.h.

$$\sum_n | \lambda_n \rangle \langle \lambda_n | = I \quad \text{mit} \quad \langle \lambda_m | \lambda_n \rangle = \delta_{mn} \quad (4.20)$$

Die auf einen Zustand $|\alpha\rangle$ projizierte Zustandsdichte bzw. lokale Zustandsdichte (LDoS) $n_\alpha(\lambda)$ von \mathbf{P} ist dann durch

$$n_\alpha(\lambda) = \sum_n |\langle \lambda_n | \alpha \rangle|^2 \delta(\lambda - \lambda_n) \quad (4.21)$$

definiert. Dies soll durch die Greensche Funktion

$$G_{\alpha\alpha}(z) = \langle \alpha | (Iz - \mathbf{P})^{-1} | \alpha \rangle \quad (4.22)$$

ausgedrückt werden, indem zunächst die Vollständigkeitsrelation (4.20) ausgenutzt wird

$$G_{\alpha\alpha}(z) = \sum_n \langle \alpha | (Iz - \mathbf{P})^{-1} | \lambda_n \rangle \langle \lambda_n | \alpha \rangle = \sum_n |\langle \alpha | \lambda_n \rangle|^2 \frac{1}{z - \lambda_n} \quad (4.23)$$

Für die weitere Auswertung sei λ_n reell. Mit $z = \omega + i\mu$ ergibt sich dann für den Imaginärteil von $(z - \lambda_n)^{-1}$

$$\text{Im} \left[\frac{1}{(\omega - \lambda_n) + i\mu} \right] = \text{Im} \left[\frac{(\omega - \lambda_n) - i\mu}{(\omega - \lambda_n)^2 + \mu^2} \right] = -\frac{\mu}{(\omega - \lambda_n)^2 + \mu^2} \quad (4.24)$$

so daß der Grenzübergang auf die δ -Funktion führt (Lorentz-Funktion)

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} \left[-\frac{\mu}{(\omega - \lambda_n)^2 + \mu^2} \right] = -\pi \delta(\omega - \lambda_n) \quad (4.25)$$

Die lokale Zustandsdichte ist demnach durch

$$n_\alpha(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \text{Im}[G_{\alpha\alpha}(\lambda + i\mu)] \quad (4.26)$$

gegeben. Unter der Annahme, daß die Funktionen $\{|\alpha\rangle\}$ ebenfalls die Vollständigkeitsrelation $\sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| = I$ erfüllen, kann hieraus die totale Zustandsdichte (TDoS) $n(\lambda) = \sum_\alpha n_\alpha(\lambda)$ bestimmt werden, indem die Spur der Matrix $(Iz - \mathbf{P})^{-1}$ gebildet wird

$$G(z) = \sum_\alpha G_{\alpha\alpha}(z) = \sum_{\alpha,n} \langle \lambda_n | \alpha \rangle \langle \alpha | \lambda_n \rangle \frac{1}{z - \lambda_n} = \sum_n \frac{1}{z - \lambda_n} \quad (4.27)$$

Es gilt also

$$n(\lambda) = -\lim_{\mu \rightarrow 0} \text{Im}[G(\lambda + i\mu)] = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \quad (4.28)$$

für reelle Eigenwerte λ_n . Im Falle der Sinai-Unordnung ist das komplette Spektrum $\sigma(\mathbf{P})$ der Übergangsmatrix \mathbf{P} reell, so daß Gleichung (4.28) uneingeschränkt angewendet werden kann. Bei verallgemeinerter binärer Unordnung sind die Eigenwerte von \mathbf{P} zwar i.a. komplex, der für das asymptotische Verhalten der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten ϵ maßgebliche Teil von $\sigma(\mathbf{P})$, der hier betrachtet werden soll, ist jedoch weiterhin reell, vgl. Abschnitt 4.1.

Zur Untersuchung der Häufung der Eigenwerte in der Nähe des maximalen Eigenwertes wird die integrierte Zustandsdichte

$$N(\lambda) = \int^\lambda n(\lambda') d\lambda' \quad (4.29)$$

benötigt, die die Zahl der Eigenwerte kleiner λ angibt. Einsetzen der Greenschen Funktion $G(z) = Sp(Iz - \mathbf{P})^{-1}$ liefert

$$N(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \int^\lambda \lim_{\mu \rightarrow 0} \text{Im} \left[Sp \left(\frac{1}{(\lambda' + i\mu)I - \mathbf{P}} \right) \right] d\lambda' \quad (4.30)$$

Da die Spurbildung eine Summation darstellt, kann die Integration in die Spurbildung hineingezogen werden. Die Spur selbst ist unabhängig von der Wahl des vollständigen Orthonormalsystems, so daß zweckmäßigerweise die Eigenvektoren von \mathbf{P} gewählt werden. Damit ergibt sich

$$N(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \text{Im} \left[Sp \left(\int^\lambda \frac{1}{(\lambda' + i\mu)I - \mathbf{P}} d\lambda' \right) \right] \quad (4.31)$$

$$= -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \text{Im} \left[\sum_\alpha \langle \lambda_\alpha | \log \frac{(\lambda + i\mu)I - \mathbf{P}}{i\mu I - \mathbf{P}} | \lambda_\alpha \rangle \right] \quad (4.32)$$

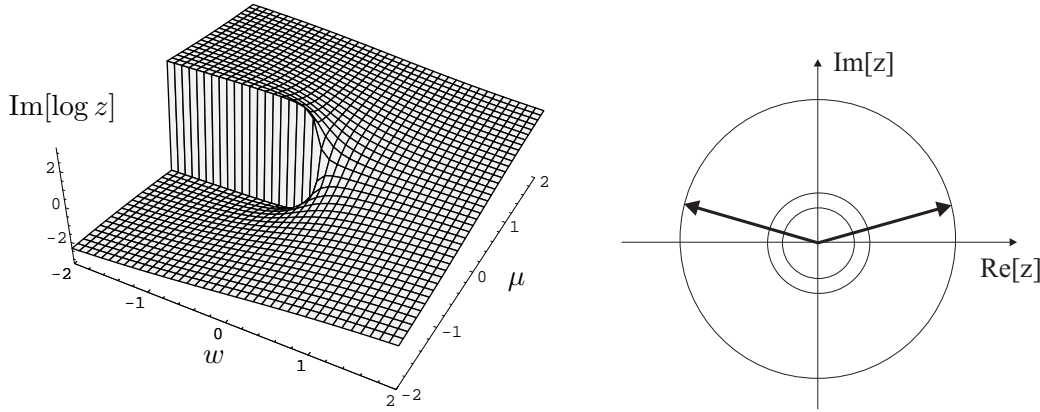


Abbildung 4.10: Links: Hauptzweig des komplexen Logarithmus $\log z$ mit $z = w + i\mu$, bei dem die negative reelle Achse aus dem Definitionsgebiet herausgenommen wird. Rechts: Ein komplexer Zeiger $z = e^{i\phi}$ mit verschwindendem positiven Imaginärteil hat als Argument entweder den Wert $\phi = 0$ oder $\phi = \pi$.

bzw. mit der Eigenwertgleichung (4.19)

$$N(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \sum_{\alpha} \log \frac{\lambda + i\mu - \lambda_{\alpha}}{i\mu - \lambda_{\alpha}} \quad (4.33)$$

Der komplexe Logarithmus erfaßt nicht die Zahl der vollen Umdrehungen eines Zeigers in der komplexen Ebene, d.h. $\log e^{i\phi} = \log e^{i(\phi+2\pi)}$. Üblicherweise wird er so definiert, daß die negative reelle Achse unstetig ist (Abb. 4.10). Dies führt dazu, daß

$$\hat{N}(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left[\log \prod_{\alpha} \frac{\lambda + i\mu - \lambda_{\alpha}}{i\mu - \lambda_{\alpha}} \right] \quad (4.34)$$

und $N(\lambda)$ nicht äquivalent sind. Der Ausdruck $\hat{N}(\lambda)$, in dem das charakteristische Polynom $\prod_{\alpha} (\lambda - i\mu - \lambda_{\alpha})$ bzw. $\prod_{\alpha} (i\mu - \lambda_{\alpha})$ durch die Determinante

$$\hat{N}(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left[\log \left(\frac{\det |(\lambda + i\mu)I - \mathbf{P}|}{\det |i\mu I - \mathbf{P}|} \right) \right] \quad (4.35)$$

ersetzt werden kann, soll dennoch weiter ausgewertet werden.

Abb. 4.10 zeigt den Zeiger einer Zahl in der komplexen Ebene. Seien $z = \lambda - \lambda_{\alpha}$ der Realteil und μ der Imaginärteil, so ist (für positive $\mu \rightarrow 0$) anhand der Abbildung ersichtlich, daß

$$\operatorname{Im} [\log(z + i\mu)] = \begin{cases} \pi & , \lambda < \lambda_{\alpha} \\ 0 & , \lambda > \lambda_{\alpha} \end{cases} \quad (4.36)$$

gilt. Dies soll für Gleichung (4.34) nach Berechnung der Determinante

$$\hat{N}(\lambda) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\mu \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left[\log \prod_{\alpha} (\lambda - \lambda_{\alpha} + i\mu) - \log \prod_{\alpha} (i\mu - \lambda_{\alpha}) \right] \quad (4.37)$$

diskutiert werden. Der Subtrahend ist unabhängig von λ , während der Minuend beim Durchfahren von λ von unten bis λ^* immer einen Sprung um $+1$ liefert, wenn ein $\lambda_{\alpha} < \lambda^*$ überschritten wird. Dies bedeutet eine Drehung um π in der komplexen Ebene. Wird die negative reelle Achse dabei überschritten, so wird, wie diskutiert, $\hat{N}(\lambda)$ um -2 zurückge-

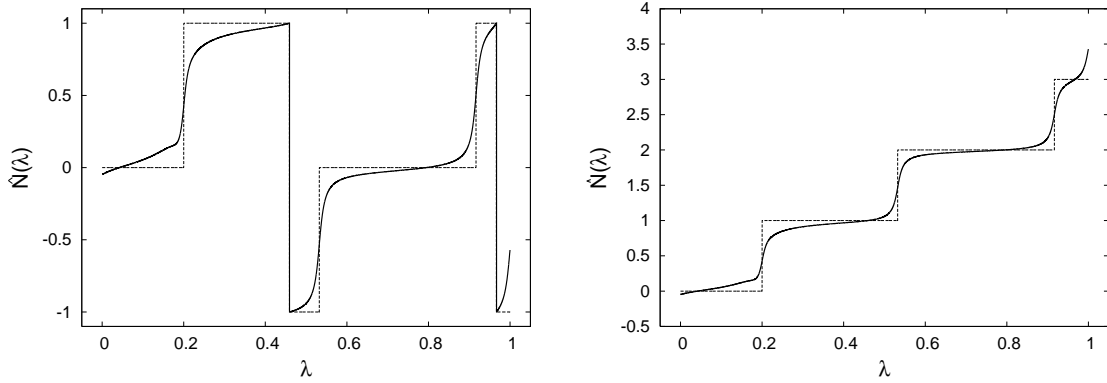


Abbildung 4.11: Links: $\hat{N}(\lambda)$ beim Durchfahren des Spektrums. Rechts: Linke Abbildung als Treppenfunktion, d.h. Sprünge um -2 werden durch Null ersetzt.

setzt. Dieses Verhalten führt auf die linke Grafik von Abb. 4.11. Eine Vergrößerung von μ bewirkt, wie ebenfalls Abb. 4.11 zu entnehmen ist, eine Abflachung der Treppentufen.

Um die Zahl der Eigenwerte zwischen zwei Werten λ_{min} und λ_{max} zu bestimmen, hat man hiermit die Möglichkeit, $\hat{N}(\lambda)$ in kleinen $\Delta\lambda$ -Schritten zu berechnen und die Sprünge um $+1$ zu zählen. Dies liefert die Treppenfunktion der rechten Grafik von Abb. 4.11. Die Schwierigkeit dieses Verfahrens besteht offenbar darin, $\Delta\lambda$ so fein zu bestimmen, daß innerhalb $\Delta\lambda$ maximal ein Eigenwert λ_α liegt. Andererseits skaliert der Rechenaufwand direkt mit $\frac{1}{\Delta\lambda}$. Eine weitere Hürde liegt darin, daß der Exponent δ als Anstieg aus einer doppeltlogarithmischen Darstellung von $N(\epsilon = -\log \lambda)$ über $|\log \epsilon|$ bestimmt wird. Deshalb muß die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ an der Stelle ϵ exakt und nicht nur bis auf eine additive Konstante bekannt sein, wofür alle Relaxationsraten ϵ_i , die kleiner als ϵ sind, berechnet werden müssen. Damit muß das Verfahren beginnend bei einem beliebigen Wert $|\log \epsilon|$ immer bis zur Grenze der Rechengenauigkeit bei $|\log \epsilon|$ durchgeführt werden,⁹ wobei für alle Relaxationsraten $|\log \epsilon_i| \leq |\log \epsilon|$ zu gelten hat.¹⁰ Es darf also keine unbekannte Zahl von Relaxationsraten außerhalb der Rechengenauigkeit liegen.

In Abb. 4.12 (links) wurde das beschriebene Verfahren für die Berechnung der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ bei sehr kleinen Werten von ϵ für Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 8000$ genutzt. Die Dimension L der Matrix \mathbf{P} ist damit erheblich größer als bei Abb. 4.7, so daß nun die Relaxationsraten ϵ_i bis $|\log \epsilon| \approx 30$ dicht genug für die Bestimmung des Exponenten δ liegen. Der Abbildung ist zu entnehmen, daß sich der Anstieg und damit der Exponent δ für $|\log \epsilon| > 20$ auf $\delta \approx 2$ und damit das Ergebnis der Sinai-Unordnung ändert. Sind die Übergangsmatrizen \mathbf{P} und damit L kleiner, ist dies nicht zu beobachten, wie Abb. 4.12 (rechts) verdeutlicht. Sie faßt die Ergebnisse der Berechnung der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ wie in Abschnitt 4.3.1 mit $L = 3000$ und Abb. 4.12 (links) zusammen.

Einen systematischen Überblick über den mit der Greenschen Funktion bestimmten Exponenten δ bei Variation der Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_1(\kappa) = \left\{ \frac{4}{10} - 2\kappa, \frac{7}{40} + \kappa, \frac{1}{10}, \frac{5}{40} + \kappa, \frac{2}{10} - \kappa \right\} \quad (4.38)$$

gibt Abb. 4.13 (links). Die obere Kurve zeigt dabei das Ergebnis, wenn für die Bestimmung

⁹ ϵ ist die Maschinengenauigkeit, d.h. die kleinste Zahl, für die $1 + \epsilon$ noch von 1 unterschieden werden kann.

¹⁰Die Relaxationsrate zum maximalen Eigenwert $\lambda_{max} = 1$ von \mathbf{P} ist nicht definiert bzw. unendlich. Laut Gleichung (4.8) besteht der lineare Zusammenhang $\log N(\epsilon) = \log c - \delta |\log \epsilon|$. Ist $N(\epsilon)$ nur bis auf eine additive Konstante bekannt, kann der Exponent δ aus dieser Beziehung nicht mehr bestimmt werden.

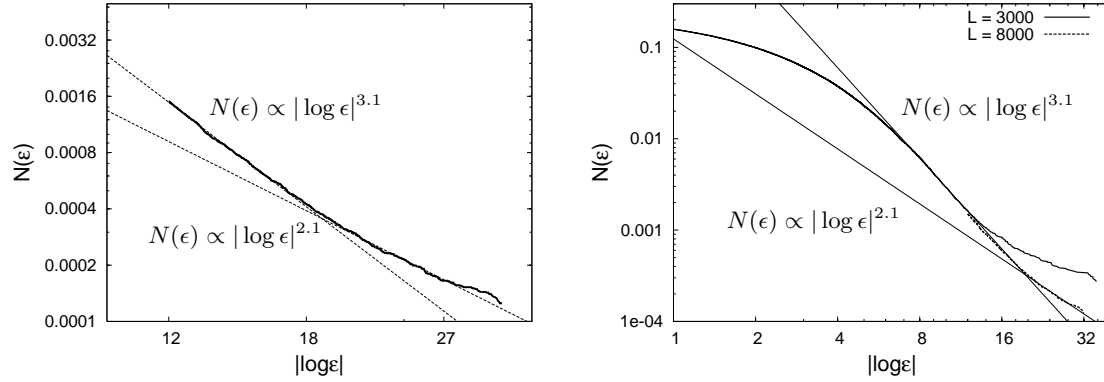


Abbildung 4.12: Links: Für $12 \leq |\log \epsilon| \leq 32$ wurde die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ für $\mathbf{p}_1(0)$, Gleichung (4.38), über die Greensche Funktion aus $Z = 125$ Realisierungen der $(L \times L)$ -Übergangsmatrix \mathbf{P} mit $L = 8000$ bestimmt. Bei $|\log \epsilon| > 18$ wird der Exponent δ etwa zwei und zeigt damit das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung. Rechts: Aus der Berechnung aller Eigenwerte von $Z = 50$ Realisierungen von $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 3000$ und $\mathbf{p}_1(0)$ ist der Verlauf von $N(\epsilon)$ gegeben. Für $|\log \epsilon| > 16$ treten dabei nur noch vereinzelt Werte auf, so daß die Bestimmung des Exponenten δ dort nicht sinnvoll ist. Wird $N(\epsilon)$ für diesen Bereich aus der linken Grafik ergänzt, so ergibt sich ein Verlauf wie in Abb. 4.6 für die Sinai-Unordnung.

des Exponenten δ die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ bis $|\log \epsilon| = 18$ ausgewertet wurde. Die untere Kurve zeigt den Exponenten δ für größere $|\log \epsilon|$, wenn die Relaxationsraten ϵ_i dicht genug für die Auswertung lagen. Bis auf $\kappa \approx \frac{1}{7}$, wo sich die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,i-2}$ und $p_{i,i+2}$ bzw. $p_{i,i-1}$ und $p_{i,i+1}$ sehr stark annähern und damit das System fast symmetrisch wird, ergibt sich bei der Dimension $L = 8000$ der Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $\delta \approx 2$ das von der Sinai-Unordnung bekannte Verhalten. Der Vergleich mit Abb. 4.6 läßt den Schluß zu, daß für $\kappa \approx \frac{1}{7}$ bei deutlich größeren L ebenfalls der Exponent δ zu $\delta = 2$ bestimmt werden kann. Die angesprochenen Probleme der Methode zeigen sich für die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_2(\kappa) = \left\{ \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6} \right\} \quad (4.39)$$

in Abb. 4.13 (rechts), wobei das Vorgehen analog zur linken Grafik ist. Über einen großen Bereich von κ ist der Exponent δ ebenfalls etwa zwei, mit drei Ausnahmen. Bei $\kappa = \frac{1}{6}$ sind die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}_2(\frac{1}{6})$ symmetrisch, dort gilt ein anderer funktionaler Zusammenhang. In der Nähe dieser Stelle sind wie bei Abb. 4.13 (links) die Übergangsmatrizen $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ zu klein, um das asymptotische Verhalten richtig zu erfassen. Wenn sich κ der Null oder $\frac{1}{2}$ nähert, weicht der Exponent δ ebenfalls deutlich von $\delta = 2$ ab. Hier liegt das Abweichen darin begründet, daß mit hoher Wahrscheinlichkeit bei $L = 8000$ Relaxationsraten ϵ_i mit $|\log \epsilon_i| > |\log \epsilon|$ und damit außerhalb der Rechengenauigkeit auftreten. Die integrierte Zustandsdichte ist dann nur bis auf eine additive Konstante bekannt.

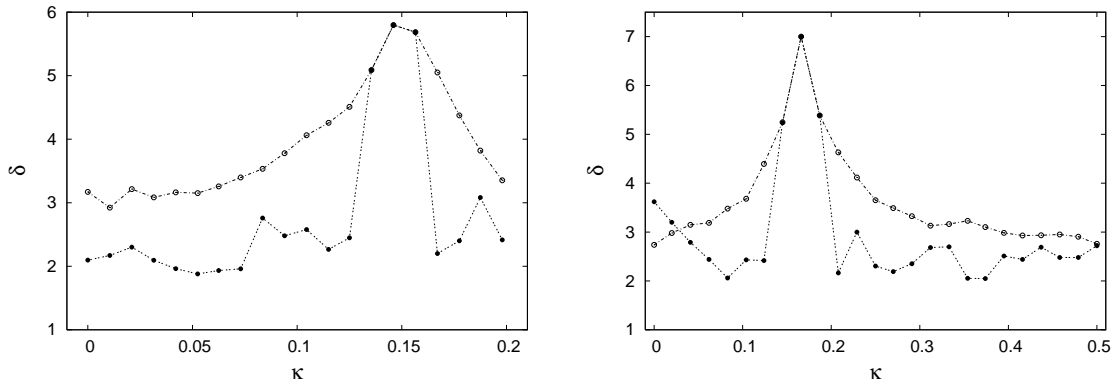


Abbildung 4.13: Wie in Abb. 4.12 (links) wurden zwei Werte für den Exponenten δ für $\mathbf{p}_1(\kappa)$, Gleichung (4.38), (links) und $\mathbf{p}_2(\kappa)$, Gleichung (4.39), (rechts) aus je $Z = 125$ Realisierungen der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 8000$ bestimmt. Für die oberen Kurven wurden nur Werte $|\log \epsilon| \lesssim 16$ herangezogen, womit die Ergebnisse denen von Abb. 4.8 entsprechen. Dort wurde also nur das präasymptotische Verhalten erfaßt. Die hier verwendeten erheblich größeren Übergangsmatrizen erlauben die Bestimmung von δ bei größeren $|\log \epsilon|$, wo das von der Sinai-Unordnung bekannte Verhalten mit $\delta = 2$ gut bis auf die Fälle reproduziert werden kann, in denen \mathbf{P} fast symmetrisch wird (bei $\mathbf{p}_1(\kappa \approx \frac{1}{7})$, $\mathbf{p}_2(\kappa \approx \frac{1}{6})$) oder nicht alle Relaxationsraten innerhalb der Rechengenauigkeit liegen (bei $\mathbf{p}_2(\kappa \approx 0)$ und $\mathbf{p}_2(\kappa \approx \frac{1}{2})$).

5 Entweichrate

Das diffusive Verhalten ist mit den Entweichraten (*escape rates*) aus Regionen des Zustandsraumes verknüpft [24, 25], die in diesem Kapitel untersucht werden sollen. Die Entweichrate γ gibt an, wie die Zahl $Z(t)$ von Partikeln in einem Gebiet exponentiell mit $Z(t) \propto Z_0 e^{-\gamma t}$ abnimmt. Ein solcher exponentieller Zerfall ist typischerweise bei glatter Anfangsverteilung nach einer hinreichend großen Zeit zu beobachten [62]. In normal diffusiven Systemen (ohne Drift) hängt dabei die Entweichrate $\gamma = \gamma(L)$ nicht nur von der Größe L des Gebietes ab, sondern ist im Kontinuumsmites $L \rightarrow \infty$ mit der Diffusionskonstanten D über die Beziehung $\gamma(L) \propto D \left(\frac{\chi}{L}\right)^2$ mit einem durch die Geometrie bestimmten Faktor χ verknüpft. Bei den hier untersuchten Systemen verschwindet die Diffusionskonstante D , so daß die Entweichrate $\gamma(L)$ schneller als L^{-2} zerfallen muß.

Die Entweichrate $\gamma(L)$ soll im diskreten Fall anhand der Kette $\mathcal{S} \cup \{L+1\}$ der Länge $L+1$ in Abb. 5.1 untersucht werden. Der Gitterpunkt 1 sei dabei durch reflektierende Randbedingungen gekennzeichnet, während das andere Ende bei $L+1$ absorbierend sei. Die Kette $\mathcal{S} \cup \{L+1\}$ ist somit reduzibel, d.h., die Region \mathcal{S} entleert sich mit der Zeit, und alle Zufallswanderer sammeln sich bei $L+1$. Für die Entleerung von \mathcal{S} ist dabei nicht die Übergangsmatrix der vollständigen Markovkette $\mathcal{S} \cup \{L+1\}$ entscheidend, sondern die Submatrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit den Einträgen $(\mathbf{Q})_{i,j} = p_{i,j}$, die die Übergänge ausgehend von allen Punkten von \mathcal{S} wiedergibt. Liegt Sinai-Unordnung und damit die Beschränkung auf Nächstnachbarübergänge vor, ist die Zeilensumme $\sum_j p_{i,j}$ von \mathbf{Q} nur in der letzten Zeile $\langle L | \mathbf{Q}$ ungleich eins, im Falle der verallgemeinerten binären Unordnung mit Übergängen zu übernächsten Nachbarn trifft dies auf die letzten beiden Zeilen $\langle L | \mathbf{Q}$ und $\langle L-1 | \mathbf{Q}$ zu. Die Submatrix \mathbf{Q} ist folglich substochastisch mit einem maximalen Eigenwert λ_{max} kleiner als Eins.¹ Bezeichne λ_i einen Eigenwert von \mathbf{Q} und $|\lambda_i\rangle$ den zugehörigen Eigenvektor. Die Zeitentwicklung der Dichte $\langle \pi(t) |$ in \mathcal{S} ausgedrückt in der spektralen Zerlegung von \mathbf{Q}

$$\langle \pi(t) | = \langle \pi(0) | \mathbf{Q}^t = \langle \pi(0) | \left(\sum_{i=1}^L |\lambda_i\rangle \lambda_i^t \langle \lambda_i| \right) \quad (5.1)$$

offenbart dann, daß der Zerfall von $\langle \pi(0) |$ auf \mathcal{S} asymptotisch durch den maximalen Ei-

¹Das Perron-Frobenius-Theorem sichert, daß dieser maximale Eigenwert reell ist und die zugehörigen Eigenvektoren keine negativen Einträge besitzen.

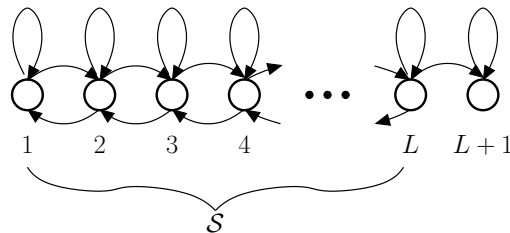


Abbildung 5.1: Eindimensionale Kette $\mathcal{S} \cup \{L+1\}$ mit reflektierenden Randbedingungen am Gitterpunkt 1 und absorbierendem Zustand bei $L+1$.

genwert λ_{max} von \mathbf{Q} dominiert wird, d.h.

$$\gamma(L) = -\log(\lambda_{max}(L)) \quad (5.2)$$

Die Abhängigkeit der Entweichrate $\gamma(L)$ von der Größe L der Kette \mathcal{S} kann untersucht werden, indem zusätzliche Gitterpunkte unmittelbar vor dem absorbierenden Zustand eingeführt werden, die dieselben Eigenschaften wie die schon zu \mathcal{S} gehörenden Punkte aufweisen. Eine äquivalente Bild hierzu ist die Annahme einer gegebenen halbunendlichen Kette \mathcal{S}_∞ ohne absorbierenden Zustand. Hiervon wird am linken Rand ein Stück \mathcal{S} der Länge L abgetrennt. Im Bild der Übergangsmatrizen ist dies gleichbedeutend mit dem Ausschneiden einer $L \times L$ -Matrix \mathbf{Q} aus der nordwestlichen Ecke einer halbunendlichen Übergangsmatrix \mathbf{P}_∞ mit reflektierenden Randbedingungen auf der linken Seite:

$$\mathbf{P}_\infty = \left(\begin{array}{c|c} \begin{array}{c|c} \mathbf{Q}_{L_1} & \\ \hline \mathbf{Q}_{L_2} & \end{array} & \\ \hline \dots & \end{array} \right) \quad (5.3)$$

5.1 Asymptotisches Verhalten und charakteristischer Exponent β

5.1.1 Sinai-Unordnung

Am Ende von Abschnitt 2.1.1 wurde die mittlere Zeit τ in einer nach beiden Seiten offenen Kette mit Sinai-Unordnung diskutiert, die ein am Gitterpunkt 1 startender Random walker benötigt, bis er zum ersten Mal den Gitterpunkt L erreicht. Hier wird allerdings die Ersterreichungszeit τ für die halbunendliche Kette aus Abb. 5.1 zur Angabe der Entweichrate $\gamma \propto \frac{1}{\tau}$ benötigt.² Noskowitz und Goldhirsch [63, 64] konnten zeigen, daß für typische Ersterreichungszeiten τ asymptotisch

$$\log \tau \propto \sqrt{L} \quad (5.4)$$

gilt, während das Unordnungsmittel $\bar{\tau}$ mit $\log \bar{\tau} \propto L$ von sehr seltenen Ereignissen dominiert wird. Für die längenabhängige Entweichrate $\gamma(L)$ folgt damit für $L \rightarrow \infty$

$$-\log \gamma(L) \propto L^\beta \text{ bzw. } \gamma(L) = a \cdot e^{-b \cdot L^\beta} \text{ mit } \beta = \frac{1}{2} \quad (5.5)$$

In Analogie zu den Betrachtungen der integrierten Zustandsdichte der Relaxationsraten wird β ebenfalls charakteristischer Exponent genannt.

Typische Realisierungen Um den Exponenten β numerisch aus endlichen Systemen zu bestimmen, ist das Unordnungsmittel durchzuführen. Dabei ist zu beachten, daß Gleichung (5.5) nur für typische Unordnungsrealisierungen gilt. Eine typische Unordnungsrealisierung ist durch ein ausgeprägtes globales Minimum auf \mathcal{S} gekennzeichnet, die mittlere Entweichrate $\gamma(\bar{L})$ wird jedoch durch atypische Realisierungen mit nahezu zwei gleich tiefen Minima dominiert, was auch schon für typische Ersterreichungszeiten $\tau(L)$ diskutiert wurde [64]. Im Gegensatz zu $\gamma(L)$ wird $\log \gamma(L)$ allerdings durch typische Unordnungsrealisierungen

²Die Ersterreichungszeit τ kann auch als mittlere Zerfallszeit aufgefaßt werden, mit der die Zahl $Z(t)$ der Random walker auf \mathcal{S} abnimmt. Für exponentielle Zerfallsprozesse, d.h. $\frac{dZ}{dt} = -\gamma t$, kann man leicht zeigen, daß $\tau = \frac{1}{\gamma}$ gilt.

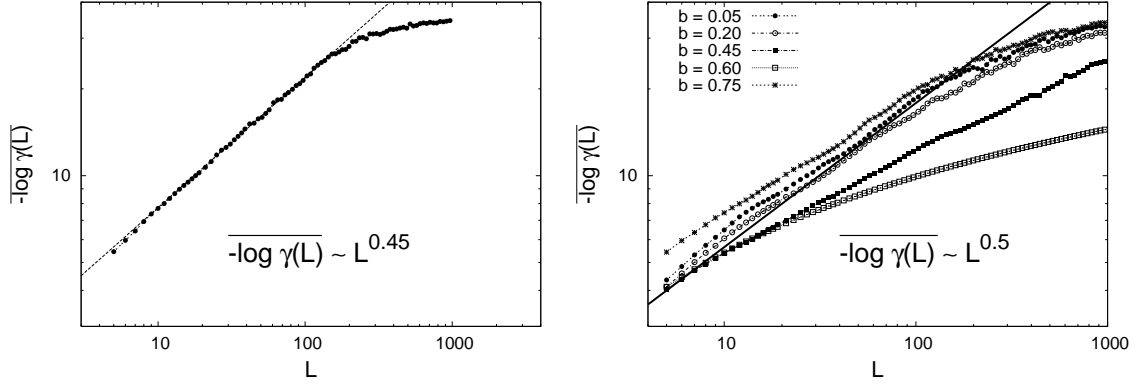


Abbildung 5.2: Links: Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{20}, \frac{13}{20}, \frac{6}{20}\}$. Der charakteristische Exponent β wurde zu $\beta = 0.45$ als Anstieg zwischen $10 \leq -\log \gamma(L) \leq 20$ bestimmt. Das Abknicken der Kurve bei großen Werten von $-\log \gamma(L)$ rührt daher, daß dort nicht mehr alle Beiträge zum Unordnungsmittel $-\log \gamma(L)$ innerhalb der Rechengenauigkeit liegen. Rechts: Sinai-Unordnung mit den Parametern $\mathbf{p} = \{\frac{1}{5}, b, \frac{4}{5} - b\}$ für verschiedene b . Die Gerade entspricht dem analytischen Ergebnis $-\log \gamma(L) \propto \sqrt{L}$ für das asymptotische Verhalten aus Gleichung (5.5)

dominiert, was im folgenden verdeutlicht werden soll. Sei $X(L)$ eine längenabhängige Zufallsvariable, deren Mittelwert $\overline{X(L)}$ durch zwei unterschiedliche Ereignisse $X_1(L)$ und $X_2(L)$ mit den Wahrscheinlichkeiten p_1 und p_2 bestimmt wird. Ferner sei

$$X_1(L) = O(1) \quad (5.6)$$

$$X_2(L) = O(L^2) \quad (5.7)$$

$$p_1(L) = 1 - O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right) \quad (5.8)$$

$$p_2(L) = O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right) \quad (5.9)$$

Der Mittelwert $\overline{X(L)}$ wächst damit gemäß

$$\overline{X(L)} = \left[1 - O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)\right] O(1) + O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right) O(L^2) = O(L^{\frac{3}{2}}) \quad (5.10)$$

und wird demzufolge durch atypische Ereignisse vorgegeben, d.h. durch Ereignisse, deren Wahrscheinlichkeit mit $L \rightarrow \infty$ verschwindet. Im Gegensatz hierzu wird

$$\overline{\log X(L)} = \left[1 - O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)\right] \log O(1) + O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right) \log O(L^2) = O(1) \quad (5.11)$$

für $L \rightarrow \infty$ von typischen Realisierungen dominiert.³ Ein ähnliches Beispiel ist in [63] gegeben und demonstriert dort atypisch dominierte $\tau(L)$.

Numerische Bestimmung Das Vorgehen zur numerischen Bestimmung des Exponenten β ist in der linken Grafik von Abb. 5.2 dargestellt. Für 100 verschiedene Unordnungsrealisierungen, d.h. 100 verschiedene Realisierungen der Matrix \mathbf{P}_∞ aus Gleichung (5.3), wurde der Ausdruck $-\log \gamma(L)$ berechnet und unordnungsgemittelt über der Länge L der Kette \mathcal{S} von Abb. 5.1 aufgetragen. Die Rechengenauigkeit für die Relaxationsraten $\gamma(L)$ wird

³Das beschriebene Beispiel ist exakt das Verhalten, daß für $X(L)$ gleich der Varianz der stationären Verteilung der Sinai-Unordnung angenommen wird [65].

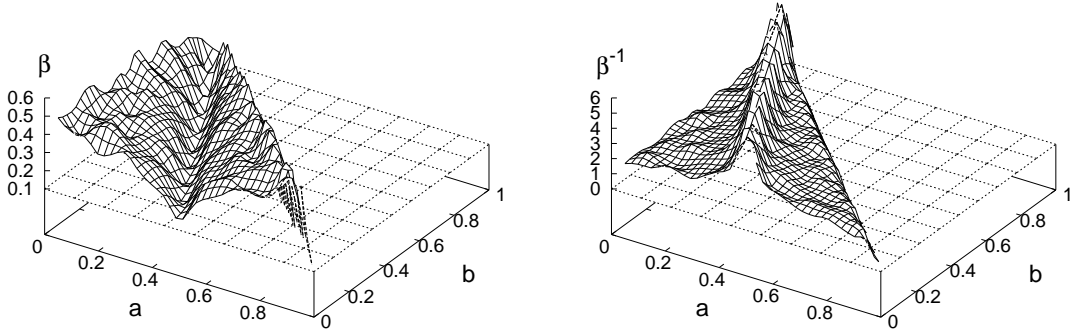


Abbildung 5.3: Ergebnisübersicht für die numerische Bestimmung des Exponenten β (links) und $\frac{1}{\beta}$ (rechts) für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$. Das Vorgehen ist analog zu Abb. 5.2 (links), wobei die Entweichrate $\gamma(L)$ bis maximal $L = 4000$ bestimmt und das Unordnungsmittel über 100 Realisierungen von \mathbf{P}_∞ gebildet wurde. Bei $a = \frac{1-b}{2}$ wird die Übergangsmatrix symmetrisch. Der Exponent β wird dort null bzw. $\frac{1}{\beta}$ unendlich.

etwa bei $\gamma(L) = 10^{-16}$ erreicht, d.h. $-\log \gamma(L) \approx 35$. Das Unordnungsmittel $-\log \gamma(L)$ sollte allerdings ausschließlich aus Einzelergebnissen innerhalb der Rechengenauigkeit bestehen. Da die Einzelbeiträge $-\log \gamma(L)$ stark streuen, ist dies nur bis $-\log \gamma(L) \approx 20$ gewährleistet. Die Beziehung (5.5) selbst gilt überdies nur asymptotisch, so daß schließlich lediglich Punkte mit $10 < -\log \gamma(L) < 20$ für die Bestimmung des Exponenten β herangezogen wurden. In der doppeltlogarithmischen Darstellung von $-\log \gamma(L)$ über der Systemgröße L in Abb. 5.2 ist der Exponent β als Anstieg gegeben.

Die rechte Grafik von Abb. 5.2 zeigt das Unordnungsmittel $-\log \gamma(L)$ für verschiedene Systeme mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{5}, b, \frac{4}{5} - b\}$ und eine Gerade, die das asymptotische Verhalten aus Gleichung (5.5) mit $-\log \gamma(L) \propto \sqrt{L}$ wiedergibt. Der zu $b = 0.05$ gehörende Graph beschreibt im Bereich $10 \leq -\log \gamma(L) \leq 20$ das asymptotisch exakte \sqrt{L} -Verhalten. Die anderen Kurven weichen hingegen immer deutlicher hiervon ab, je weiter sich b dem Wert $b = 0.6$ annähert. Bei $b = 0.6$ werden die Übergangswahrscheinlichkeiten symmetrisch und die Entweichrate $\gamma(L)$ fällt proportional zu $\frac{1}{L^2}$, womit hier der charakteristische Exponenten β für $L \rightarrow \infty$ verschwindet. Für $b = 0.75$ wird der Anstieg und damit der numerisch bestimmte Exponent β wieder größer.

Einen Überblick über die numerischen Ergebnisse bei der Bestimmung des Exponenten β in Systemen mit Sinai-Unordnung gibt die linke Grafik von Abb. 5.3. Wie bei dem charakteristischen Exponenten δ der integrierten Zustandsdichte der Relaxationsraten, Abb. 4.5, wurden auch hier die Parameter a und b in $\frac{1}{20}$ -Schritten in den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, b, 1 - a - b\}$ variiert. Asymptotisch fallen der Exponent δ und β^{-1} zusammen, $\delta = \frac{1}{\beta} = 2$, weswegen die rechte Grafik von Abb. 5.3 das Inverse von β zeigt. Die Übereinstimmung mit Abb. 4.5 ist augenfällig bis hin zu der Wölbung um $a = \frac{1-b}{2}$, wo die Übergangswahrscheinlichkeiten symmetrisch werden.⁴ In der Nähe des symmetrischen Falles sind also auch hier die Übergangsmatrizen zu klein, um das asymptotische Verhalten mit $\beta^{-1} = 2$ richtig ermitteln zu können.

5.1.2 Verallgemeinerte binäre Unordnung

Das asymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung ist nicht analytisch bekannt. Wenn ebenso wie im vorangegangenen Abschnitt

⁴Der Exponent β ist dort nicht definiert. Der Anstieg des Ausdrucks $-\log \gamma(L)$ in der doppeltlogarithmischen Darstellung über der Systemgröße L geht in diesem Fall asymptotisch gegen Null, d. h. das hieraus bestimmte β^{-1} wird unendlich.

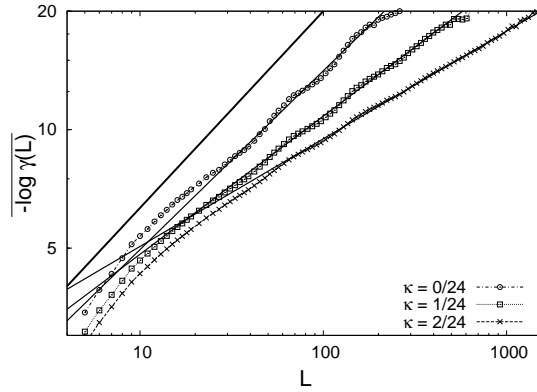


Abbildung 5.4: Für drei unterschiedliche Sätze von Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ mit $\kappa = \frac{0}{24}, \frac{1}{24}, \frac{2}{24}$ ist das Unordnungsmittel $-\log \gamma(L)$ dargestellt. Jeder Punkt entspricht dabei 50 Realisierungen der Matrix \mathbf{P}_∞ aus Gleichung (5.3). Ab $-\log \gamma(L) \approx 8$ ist deutlich ein lineares Verhalten in der gewählten Darstellung zu erkennen, wobei die aus dem Anstieg bestimmten Exponenten β mit $\beta = 0,45$ für $\kappa = \frac{0}{24}$, $\beta = 0,35$ für $\kappa = \frac{1}{24}$ und $\beta = 0,27$ für $\kappa = \frac{2}{24}$ sichtlich von der Sinai-Unordnung mit $\beta = \frac{1}{2}$ abweichen. Das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung ist links als Gerade gegeben.

verfahren wird, so erhält man Abb. 5.4. Den Grafiken ist zunächst zu entnehmen, daß ein linearer Zusammenhang zwischen dem Unordnungsmittel $-\log \gamma(L)$ und der Systemgröße L in der doppeltlogarithmischen Darstellung existiert. Der charakteristische Exponent β kann also weiterhin definiert werden, allerdings ist der Wert von β kleiner als für die Sinai-Unordnung mit $\beta = \frac{1}{2}$. Berücksichtigt man die Schwierigkeiten in der Bestimmung des Exponenten β für die Sinai-Unordnung im vorhergehenden Abschnitt und die gleichen Probleme bei der numerischen Bestimmung des Exponenten δ aus Abschnitt 4.3.1, so stellt sich auch hier die Frage, ob wirklich das asymptotische Verhalten erfaßt wurde. Ebenso kann die Entweichrate $\gamma(L)$ für die verallgemeinerte binäre Unordnung ein ausgeprägtes präasymptotisches Verhalten zeigen, daß der Gesetzmäßigkeit (5.5) mit $\beta < \frac{1}{2}$ folgt.

Wie in Abschnitt 4.3.1 ist hingegen für die Systeme aus Abschnitt 2.2.2, bei denen direkte Sprünge zu den übernächsten Gitterpunkten erlaubt sind und detaillierte Balance im stationären Zustand erfüllt ist, schon bei sehr kleinen Dimensionen L der Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung (5.5) zu beobachten, wie Abb. zeigt. Dies gilt allerdings nur, wenn ebenso wie in Abschnitt 4.3.1 der die lokale Asymmetrie bestimmende Parameter θ nicht zu klein wird.⁵

5.2 Asymptotisches Verhalten mittels Störungsrechnung

Das asymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ ist für die Sinai-Unordnung durch Gleichung (5.5) mit $\beta = \frac{1}{2}$ gegeben. Die numerische Bestimmung des Exponenten β erwies sich in Abschnitt 5.1.1 jedoch insbesondere für solche Systeme als schwierig, in denen sich die Übergangswahrscheinlichkeiten dem symmetrischen Fall annäherten. Hier waren die betrachteten Systemgrößen L offenkundig zu klein. Der Aufwand, den maximalen Eigenwert λ_{max} der Übergangsmatrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ zu berechnen, skaliert jedoch mit L^3 . In diesem Abschnitt soll der maximale Eigenwert λ_{max} und damit die Entweichrate $\gamma(L) = -\log \lambda_{max}$ näherungsweise über die Schrödingersche Störungsrechnung berechnet werden, was mit erheblich geringerem Rechenaufwand möglich ist. Es wird sich dabei in Abschnitt 5.2.1 zeigen, daß damit der Exponent β für die Sinai-Unordnung richtig be-

⁵Bei $\theta = 0$ werden die Übergangswahrscheinlichkeiten aus Abschnitt 2.2.2 symmetrisch.

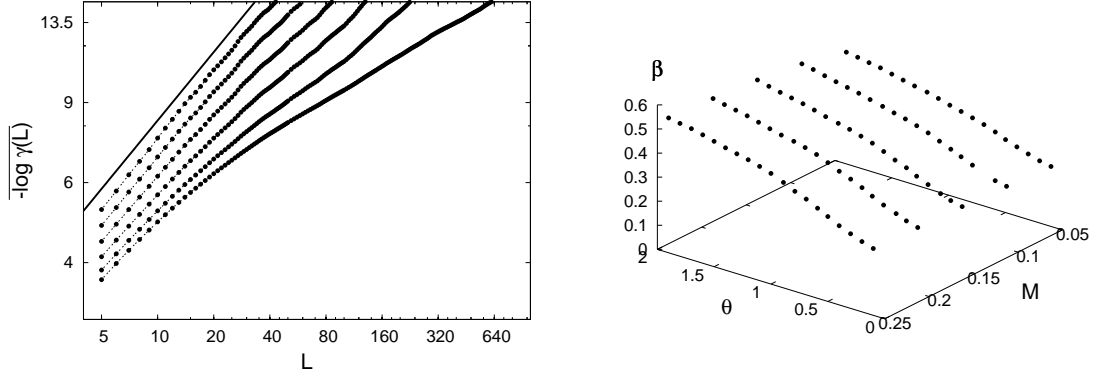


Abbildung 5.5: Für das System aus Abschnitt 2.2.2 wurde aus 100 Realisierungen der Matrix \mathbf{P}_∞ für jeden Parametersatz (θ, M) die Größe $-\log \gamma(L)$ bis maximal $L = 1000$ ermittelt und der Exponent β wie in Abb. 5.2 bestimmt. In der linken Grafik fällt bei $M = 0.15$ der Parameter θ von links nach rechts von 1.7 auf 0.2. Das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung (5.5) ist als Gerade gegeben. Der numerisch bestimmte Exponent β ist unabhängig von M , wie die rechte Grafik zeigt, und weicht nur für kleine θ , also in der Nähe des symmetrischen Falles, von $\delta = \frac{1}{2}$ ab.

stimmt werden kann. Die Störungsrechnung zeigt allerdings erhebliche Abweichungen vom exakten Ergebnis im symmetrischen Fall, Abschnitt 5.2.2, und liefert auch keine sinnvolle Näherung für die Entweichrate $\gamma(L)$ selbst, Abschnitt 5.2.3. Darüber, ob die Störungsrechnung den Exponenten β für die verallgemeinerte binäre Unordnung asymptotisch richtig bestimmt, können keine Aussagen getroffen werden. Die Anwendung der Störungsrechnung in diesem Fall in Abschnitt 5.2.4 zeigt allerdings, daß sich asymptotisch das Verhalten der Sinai-Unordnung mit $\beta = \frac{1}{2}$ einstellt.

Schrödingersche Störungsrechnung Im folgenden wird die zu Beginn von Kapitel 5 eingeführte Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ als gestörte Übergangsmatrix eines geschlossenen Systems der Länge L mit der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ betrachtet. Die Matrix \mathbf{P} weiche dabei von \mathbf{Q} lediglich durch reflektierende Randbedingungen auch auf der rechten Seite ab, wodurch \mathbf{P} zu einer stochastischen Zeilenmatrix wird. Die Störmatrix $\hat{\mathbf{Q}}$ sei gegeben durch $\hat{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q} - \mathbf{P}$. Offensichtlich sind mit Ausnahme einiger weniger Einträge in den letzten Zeilen alle Einträge von $\hat{\mathbf{Q}}$ null. Ferner gelten für \mathbf{P} und \mathbf{Q} die Eigenwertgleichungen

$$\mathbf{P}|\lambda_i^{(0)}\rangle = \lambda_i^{(0)}|\lambda_i^{(0)}\rangle \quad (5.12)$$

$$\mathbf{Q}|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle \quad (5.13)$$

Die Störungsrechnung liefert dann als Korrektur erster Ordnung für den maximalen Eigenwert λ_{max} von \mathbf{Q} , d.h. $\lambda_{max} \approx \lambda_{max}^{(0)} + \lambda_{max}^{(1)}$,

$$\lambda_{max}^{(1)} = \frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle}{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} \quad (5.14)$$

Für die Matrix \mathbf{P} , deren Einträge alle nicht negativ und deren Zeilensummen alle eins sind, besagt das Perron-Frobenius-Theorem, daß der maximale Eigenwert $\lambda_{max}^{(0)}$ eins ist. Ferner ist den konstanten Zeilensummen zu entnehmen, daß im zugehörigen Rechtseigenvektor $|\lambda_{max}^{(0)}\rangle$ alle Einträge gleich sind. Für den Linkseigenvektor $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ wird hingegen die Eigenwertgleichung $\langle \lambda_{max}^{(0)} | \mathbf{P} = \langle \lambda_{max}^{(0)} |$ zur Bestimmungsgleichung für die stationäre Dichte $\langle \pi |$ des geschlossenen Systems bzw. eines Vielfachen hiervon.⁶

⁶Alle Einträge der stationären Dichte sind größer als null, da die Matrix \mathbf{P} irreduzibel ist.

Die Summe $\lambda_{max}^{(0)} + \lambda_{max}^{(1)}$ bildet eine untere Schranke für den Eigenwert λ_{max} , wie man sich leicht überlegen kann, wenn man die Vektoren $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ und $| \lambda_{max}^{(0)} \rangle$ in der Basis der (normierten) Eigenvektoren der Matrix \mathbf{Q} darstellt:

$$\frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \mathbf{Q} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle}{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} = \frac{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \langle \lambda_n | \mathbf{Q} | \lambda_m \rangle}{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \langle \lambda_n | \lambda_m \rangle} \quad (5.15)$$

$$= \frac{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \lambda_m \delta_{m,n}}{\sum_{n,m} \alpha_n^* \alpha_m \delta_{m,n}} \quad (5.16)$$

$$= \frac{\sum_n \alpha_n^* \alpha_n \lambda_n}{\sum_n \alpha_n^* \alpha_n} \quad (5.17)$$

$$\leq \lambda_{max} \frac{\sum_n |\alpha_n|^2}{\sum_n |\alpha_n|^2} = \lambda_{max} \quad (5.18)$$

Daraus folgt unmittelbar mit $\mathbf{Q} = \mathbf{P} + \hat{\mathbf{Q}}$

$$\lambda_{max} \geq \frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \mathbf{P} + \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle}{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} = \lambda_{max}^{(0)} + \lambda_{max}^{(1)} \quad (5.19)$$

bzw.

$$\lambda_{max}^{(1)} \leq 0 \quad (5.20)$$

5.2.1 Sinai-Unordnung

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, daß die Störungsrechnung erster Ordnung das asymptotische Verhalten des Unordnungsmittels $-\overline{\log \gamma(L)}$ für die Sinai-Unordnung richtig reproduziert.

Analytische Rechnung Laut Gleichung (5.2) ist die Entweichrate $\gamma(L)$ durch den Logarithmus des maximalen Eigenwertes λ_{max} von \mathbf{Q} gegeben. Die Störungsrechnung erster Ordnung liefert $\gamma(L) \approx -\log(\lambda_{max}^{(0)} + \lambda_{max}^{(1)})$. Da der maximale Eigenwert $\lambda_{max}^{(0)}$ der ungestörten Matrix \mathbf{P} eins ist, kann zusätzlich der Logarithmus linear approximiert werden:⁷

$$\gamma(L) \approx -\lambda_{max}^{(1)}(L) \quad (5.21)$$

Damit ergibt sich mit Gleichung (5.14)

$$-\overline{\log \gamma(L)} \approx \overline{\log \langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} - \overline{\log \langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} \quad (5.22)$$

Die Störmatrix $\hat{\mathbf{Q}}$ besitzt nur einen von null verschiedenen Eintrag, nämlich $(\hat{\mathbf{Q}})_{L,L} = \langle L | \hat{\mathbf{Q}} | L \rangle$, womit von den Vektoren $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ und $| \lambda_{max}^{(0)} \rangle$ nur der jeweils letzte Eintrag benötigt wird. Wie in Abschnitt 5.2 diskutiert, ist der Linkseigenvektor ein Vielfaches der stationären Dichte $\langle \pi |$ des abgeschlossenen Systems, während der Rechtseigenvektor nur konstante Einträge besitzt. Wenn die letzteren alle eins gesetzt werden und $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ durch das Potential, Gleichung (2.22), dargestellt wird, ist das Skalarprodukt $\langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle$ im Minuend die in Gleichung (2.23) angegebene Zustandssumme Z_L , und es ergibt sich

$$-\overline{\log \gamma(L)} \approx \overline{\log Z(L)} + \overline{V_L} - \overline{\log | \hat{\mathbf{Q}}_{L,L} |} \quad (5.23)$$

⁷Die Korrekturen $\lambda_{max}^{(1)}$ müssen betragsmäßig klein sein, um die Störungsrechnung überhaupt anwenden zu können.

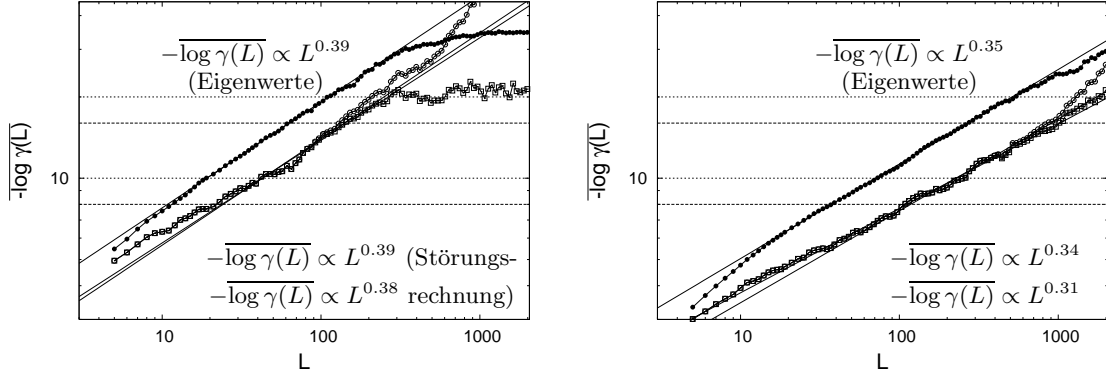


Abbildung 5.6: Die Entweichrate bzw. $-\overline{\log \gamma(L)}$ wurde über den maximalen Eigenwert (volle Punkte) und mittels Störungsrechnung (leere Quadrate) für die Parameter $\mathbf{p} = \{\frac{1}{20}, \frac{1}{20}, \frac{7}{20}\}$ (links), $\mathbf{p} = \{\frac{1}{20}, \frac{15}{20}, \frac{4}{20}\}$ (rechts) bestimmt. Für jeden Datenpunkt wurde dabei über 100 Realisierungen der Matrix \mathbf{P}_∞ gemittelt, wobei dieselben Matrizen \mathbf{P}_∞ für die Eigenwertberechnung und die Störungsrechnung verwendet wurden. Um den Exponenten β zu erhalten, wurde bei der oberen Kurve der Bereich $10 < -\log \gamma < 20$ und bei den beiden unteren $8 < -\log \gamma < 16$ herangezogen. Die Kurven mit Störungsrechnung liegen unter dem Ergebnis der Eigenwertberechnung, da die Störungsrechnung gemäß Gleichung (5.19) eine untere Schranke für den Eigenwert λ_{max} liefert und somit das Ergebnis systematisch unterschätzt. Für die Abweichungen vom analytisch exakten Ergebnis $\beta = \frac{1}{2}$ vgl. Abschnitt 5.1.1.

Umsortieren der das Potential V_L definierenden Summe (2.22)

$$\overline{V}_L = - \sum_{l=2}^{L-1} \log \frac{p_{l,l+1}}{p_{l,l-1}} - \log \frac{p_{1,2}}{p_{L,L-1}} \quad (5.24)$$

und Berücksichtigung der Rekurrenzbedingung $\overline{\log \frac{p_{i,j}}{p_{j,i}}} = 0$ zeigen, daß \overline{V}_L , wie für ein System ohne globale Vorzugsrichtung zu erwarten, unabhängig von L ist. Für die Größe $\log |\hat{Q}_{L,L}|$ ist dies offenkundig ebenfalls erfüllt. Es verbleibt somit die Berechnung der L -Abhängigkeit des Ausdrucks $\overline{\log Z_L}$ in Gleichung (5.23). In [65] wurde aufbauend auf [66, 67] gezeigt, daß

$$\overline{\log Z_L} = c_0 + c_1 \sqrt{L} + O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right) \quad (5.25)$$

gilt, womit sich der richtige Exponent $\beta = \frac{1}{2}$ für das Mittel $-\overline{\log \gamma(L)} \propto L^\beta$ ergibt.

Numerische Ergebnisse In Abb. 5.6 ist für zwei Systeme das Ergebnis der Störungsrechnung für das Unordnungsmittel $-\overline{\log \gamma(L)}$ vergleichend mit dem aus Abschnitt 5.1.1 dargestellt, wobei die für die Störungsrechnung maßgebliche stationäre Dichte auf zwei unterschiedliche Arten bestimmt wurde. Die numerische Bestimmung der stationären Dichte wird in Abschnitt 6.1 eingehend behandelt, an dieser Stelle ist lediglich von Bedeutung, daß die beiden Berechnungsmethoden für $-\overline{\log \gamma(L)} \gtrapprox 20$ nicht mehr das gleiche Ergebnis liefern, folglich der Algorithmus für die Störungsrechnung ab da nicht mehr zuverlässig ist. Für $-\overline{\log \gamma(L)} < 20$ ist den Grafiken zu entnehmen, daß die Störungsrechnung den Anstieg in der log-log-Darstellung, also den Exponenten β , richtig reproduziert, bei deutlich ausgeprägteren Schwankungen. Die Störungsrechnung erfordert also offenbar die Mittelung über mehr Unordnungsrealisierungen.

Analog zu den Abbildungen 5.3 und 4.5 zeigt Abb. 5.7 (links) $\frac{1}{\beta}$ als Ergebnis der Störungsrechnung für $\mathbf{p} = \{a, b, 1-a-b\}$ im Dreieck $\{(a, b) : 0 < a < 1 \wedge 0 < b < 1-a\}$. In das andere Dreieck der Einheitszelle $[0, 1) \times [0, 1)$ wurde zum Vergleich das Ergebnis mittels

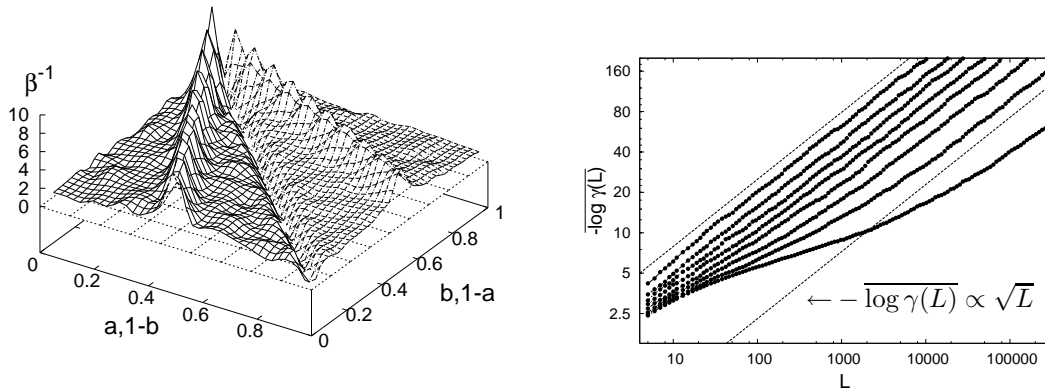


Abbildung 5.7: Links: Im Dreieck $\{(a, b) : 0 < a < 1 \wedge 0 < b < 1 - a\}$ ist das Inverse des Exponenten β als Ergebnis der Störungsrechnung dargestellt. Das Dreieck $\{(a, b) : 0 < b < 1 \wedge 1 - b < a < 1\}$ zeigt die an $1 - a = b$ gespiegelten Ergebnisse aus der Berechnung des maximalen Eigenwertes der Übergangsmatrizen aus Abschnitt 5.1.1. Die numerischen Ergebnisse stimmen sehr gut überein. Rechts: Für die Sinai-Unordnung mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, \frac{1}{10}, \frac{9}{10} - a\}$, wobei sich a von links $a = \frac{7}{100}$ nach rechts $a = \frac{42}{100}$ in $\frac{5}{100}$ -Schritten ändert, ist das mit Störungsrechnung bestimmte Mittel $-\log \gamma(L)$ dargestellt. Die beiden gestrichelten Linien zeigen $-\log \gamma(L) \propto \sqrt{L}$, das analytisch exakte asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung.

Berechnung des maximalen Eigenwertes gespiegelt. Wie bereits diskutiert, ist die $\frac{1}{\beta}$ -Fläche aus der Störungsrechnung weniger glatt, reproduziert aber davon abgesehen überzeugend das Ergebnis aus Abschnitt 5.1.1.

Die detaillierte Balance im stationären Zustand für abgeschlossene Systeme mit Sinai-Unordnung kann auch numerisch genutzt werden, um die Berechnung zu beschleunigen. Hierzu wähle man für den Rechtseigenvektor in Gleichung (5.14) den Vektor $|\eta\rangle$ mit allen Einträgen gleich eins und für den Linkseigenvektor die stationäre Dichte $\langle\pi|$. Das Mittel $-\log \gamma(L)$ ist damit asymptotisch durch

$$-\overline{\log \gamma(L)} = -\overline{\log \langle\pi| \hat{\mathbf{Q}} |\eta\rangle} = -\overline{\log [\pi_L(\hat{\mathbf{Q}})_{L,L}]} \quad (5.26)$$

gegeben. $\log \pi_L = -V_L + \log \pi_1$ kann iterativ aus

$$V_L = V_{L-1} - \log \frac{p_{L-1,L}}{p_{L,L-1}} \quad (5.27)$$

bestimmt werden, wobei π_1 gemäß Gleichung (2.23) in jedem Schritt anzupassen ist. Dies umgeht zum einen Probleme mit der numerischen Genauigkeit bei der Berechnung eines Eigenvektors aus einem Gleichungssystem $\langle\lambda_{\max}^{(0)} | \mathbf{P} = \langle\lambda_{\max}^{(0)} |$, und zum anderen ist es auch nicht erforderlich, eine Übergangsmatrix zu speichern. In Abb. 5.7 (rechts) wurde dieses Verfahren genutzt, so daß Punkte am rechten Rand der Grafik Werten in der Größenordnung 10^{-80} für $\lambda_{\max}^{(1)}$ entsprechen. Die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{a, \frac{1}{10}, \frac{9}{10} - a\}$ nähern sich von rechts nach links in $\frac{1}{20}$ -Schritten in a dem symmetrischen Fall bei $a = \frac{9}{20}$ immer weiter an, und es ist dabei deutlich zu erkennen, daß die einzelnen Graphen erst bei immer größeren L auf das \sqrt{L} -Verhalten einschwenken, was auch schon für den Exponenten δ in Abb. 4.6 beobachtet wurde.

5.2.2 Homogener Fall

Numerische Probleme bei der Bestimmung des asymptotischen Verhaltens der Entweichrate $\gamma(L)$ treten vor allem dann auf, wenn sich die Übergangswahrscheinlichkeiten stark angleichen. Die Störungsrechnung bietet hier die Möglichkeit, den Exponenten β für deutlich größere Systeme zu bestimmen. In diesem Abschnitt soll untersucht werden, ob die Störungsrechnung auch sinnvolle Ergebnisse für das asymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ symmetrischer Systeme selbst liefert.

Gegeben sei dazu ein System \mathcal{S} der Länge L , bei dem die Übergangswahrscheinlichkeiten an jedem Gitterpunkt gleich sind. Im Kontinuumsmites ist dann die Zeitentwicklung der Dichte $\rho(x, t)$ auf \mathcal{S} durch die Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -v \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} + \frac{D}{2} \frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} \quad (5.28)$$

gegeben. Der Parameter v bezeichnet hierbei die Driftgeschwindigkeit des Systems, D die Diffusionskonstante. Die Lösung des an beiden Enden offenen Systems, d.h. $\rho(0, t) = \rho(L, t) = 0$, lautet

$$\rho(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-\gamma_n t} e^{\frac{v}{D}x} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (5.29)$$

mit $\gamma_n = \frac{v^2}{2D} + \frac{n^2\pi^2 D}{2L^2}$ [62]. Die Koeffizienten c_n folgen aus den Anfangsbedingungen.

Das Langzeitverhalten für die Abnahme der Dichte $\rho(x, t)$ wird durch die langsamste Mode γ_1 bestimmt, die äquivalent zur Entweichrate $\gamma(L)$ ist:

$$\gamma(L) = \gamma_1 = \frac{v^2}{2D} + \frac{\pi^2 D}{2L^2} \quad (5.30)$$

Die Entleerung des Gebietes \mathcal{S} wird also, wie zu erwarten, durch die Drift v dominiert. Ein System ohne Drift zeigt hingegen ein Skalenverhalten $\gamma(L) \propto \frac{1}{L^2}$.

Die Störungsrechnung kann dieses Skalenverhalten nicht reproduzieren, was an einem diskreten homogenen System der Länge L mit periodischen Randbedingungen und von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten für Sprünge bis zu maximal den übernächsten Nachbarn gezeigt werden soll. Die Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ hat damit die Form

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} r & p_1 & p_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & q_2 & q_1 \\ q_1 & r & p_1 & p_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & q_2 \\ q_2 & q_1 & r & p_1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & q_1 & r & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r & p_1 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q_1 & r & p_1 & p_2 \\ p_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q_2 & q_1 & r & p_1 \\ p_1 & p_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & q_2 & q_1 & r \end{pmatrix} \quad (5.31)$$

wobei r aus der Normierung der Zeilensummen folgt, d.h. $r = 1 - p_1 - p_2 - q_1 - q_2$. Der Linkseigenvektor $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ zum maximalen Eigenwert $\lambda_{max}^{(0)}$ der Matrix \mathbf{P} ist bei entsprechender Normierung die stationäre Dichte $\langle \pi |$ mit den Komponenten $\langle \pi | i \rangle = \frac{1}{L}$, $i = 1, \dots, L$. Setzt man zusätzlich den Rechtseigenvektor $| \lambda_{max}^{(0)} \rangle = | \eta \rangle$, wird das Skalarprodukt im Nenner von Gleichung (5.14) eins. Das gestörte System mit der Übergangsmatrix \mathbf{Q} , zu dem die Entweichrate $\gamma(L)$ bestimmt werden soll, sei durch reflektierende Randbedingungen an der linken Seite und ein offenes rechtes Ende gekennzeichnet. Damit hat $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$

die Struktur

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} r + q_2 + q_1 & p_1 & p_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q_1 + q_2 & r & p_1 & p_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q_2 & q_1 & r & p_1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & q_1 & r & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & r & p_1 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q_1 & r & p_1 & p_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & q_2 & q_1 & r & p_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & q_2 & q_1 & r \end{pmatrix} \quad (5.32)$$

Wie in Abschnitt 5.2.1 diskutiert, ist die Entweichrate $\gamma(L)$ näherungsweise durch die erste Ordnung Störungstheorie gegeben:

$$\gamma(L) \approx -\frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \mathbf{Q} - \mathbf{P} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle}{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \lambda_{max}^{(0)} \rangle} = \langle \pi | \mathbf{Q} - \mathbf{P} | \eta \rangle \quad (5.33)$$

Mit

$$\mathbf{Q} - \mathbf{P} = \begin{pmatrix} q_2 + q_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -q_2 & -q_1 \\ q_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -q_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -p_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -p_1 & -p_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.34)$$

führt dies auf

$$\gamma(L) \approx (-2p_2 - p_1) \frac{1}{L} \quad (5.35)$$

Im Gegensatz zu dem exakten Ergebnis von Gleichung (5.30) liefert die Störungsrechnung keinen einer Driftgeschwindigkeit zuzuordnenden konstanten Beitrag sondern nur eine Abhängigkeit proportional zu L^{-1} , die auch im symmetrischen Fall der L^{-2} -Abhängigkeit in Gleichung (5.30) widerspricht. In Abb. 5.8 ist dies für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{3}{20}, \frac{14}{20}, \frac{3}{20}\}$ dargestellt, wobei wie in Abb. 5.6 die vollen Kreise die Entweichrate $\gamma(L)$ als Ergebnis der Berechnung des maximalen Eigenwertes und die leeren Kästen das Resultat der Störungsrechnung zeigen.

Die Störungsrechnung liefert also eine falsche L^{-1} -Abhängigkeit für die Entweichrate $\gamma(L)$ im Falle homogener Übergangswahrscheinlichkeiten, unabhängig von einer eventuell auftretenden Drift.

5.2.3 Störungsrechnung als Näherung für die Entweichrate

Es wurde noch keine Aussage darüber getroffen, ob die Störungsrechnung überhaupt eine sinnvolle Näherung für die Entweichrate $\gamma(L)$ darstellt. Aus der Korrektur erster Ordnung eines Eigenvektors, für normierte $\{ | \lambda_m^{(0)} \rangle \}$,

$$\langle \lambda_{max}^{(1)} | = \sum_{m \neq max} \frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_m^{(0)} \rangle}{\lambda_{max}^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} \langle \lambda_m^{(0)} | \quad (5.36)$$

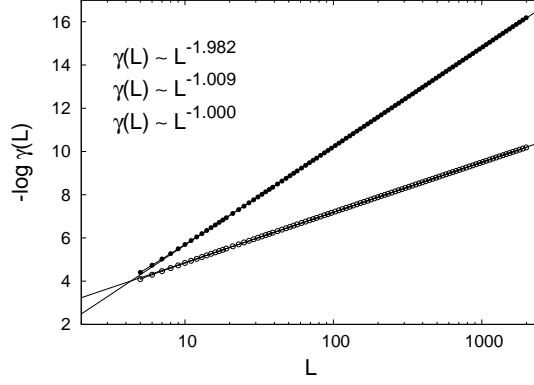


Abbildung 5.8: Entweichrate $\gamma(L)$ für eine symmetrische Übergangsmatrix \mathbf{P}_∞ mit den von Null verschiedenen Einträgen $\mathbf{p} = \{\frac{3}{20}, \frac{14}{20}, \frac{3}{20}\}$. Die vollen Kreise zeigen das richtige Ergebnis (exakt: $\gamma(L) \propto L^{-2}$, numerisch: $\gamma(L) \propto L^{-1.98}$) über die direkte Bestimmung des maximalen Eigenwertes, die leeren Kästchen sind das Resultat der Störungsrechnung, die wie in Abb. 5.6 auf zwei unterschiedliche Arten ausgeführt wurde.

folgt, daß die Störungsrechnung unter diesem Aspekt nur für

$$\left| \frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_m^{(0)} \rangle}{\lambda_{max}^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} \right| \ll 1 \quad (5.37)$$

sinnvoll ist, da sonst die Korrekturen zu $\langle \lambda_{max}^{(0)} |$ nicht „klein“ sind [68]. Der Nenner in Gleichung (5.37) ist am größten, wenn $\lambda_m^{(0)}$ der zweitgrößte Eigenwert $\lambda_{sec}^{(0)}$ der Matrix \mathbf{P} ist. Für diesen Fall soll für die Sinai-Unordnung der Ausdruck $|\lambda_{max}^{(0)} - \lambda_{sec}^{(0)}|$ über die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ abgeschätzt werden, die sich für kleine Relaxationsraten ϵ wie

$$N(\epsilon) = \frac{2}{\log^2 \epsilon} \quad (5.38)$$

verhält. Die integrierte Zustandsdichte $N(\epsilon)$ ist normiert, womit für ein System \mathcal{S} mit L Zuständen $N(\epsilon_{sec}) = \frac{2}{L}$ folgt. Die Relaxationsrate $\epsilon_{sec} = -\log \lambda_{sec}^{(0)}$ kann durch $\epsilon_{sec} \approx (1 - \lambda_{sec}^{(0)})$ genähert werden

$$N(\epsilon_{sec}) = \frac{2}{\log^2 (1 - \lambda_{sec}^{(0)})} = \frac{2}{L} \quad (5.39)$$

woraus mit $\lambda_{max}^{(0)} = 1$

$$1 - \lambda_{sec}^{(0)} = \lambda_{max}^{(0)} - \lambda_{sec}^{(0)} = e^{-\sqrt{L}} \quad (5.40)$$

folgt. Mit Gleichung (5.37) ergibt sich schließlich

$$\left| \langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_{sec}^{(0)} \rangle \right| \ll e^{-\sqrt{L}} \quad (5.41)$$

Da die Störmatrix $\hat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ bei der betrachteten Sinai-Unordnung nur einen Eintrag ungleich null aufweist, der überdies nicht von L abhängt, ist $\langle \lambda_{max}^{(0)} | L \rangle$ und damit die stationäre Dichte am Ort L ausschlaggebend.⁸ Gemäß dem Golosov-Phänomen ist die Dichte

⁸Der letzte Eintrag $\langle L | \lambda_{sec}^{(0)} \rangle$ des Rechtseigenvektors $|\lambda_{sec}^{(0)}\rangle$ wird, da \mathbf{P} eine stochastische Zeilenmatrix ist, von der Ordnung $O(1)$ sein, und damit nicht mit L fallen.

um das Minimum der Potentiallandschaft konzentriert, und für $L \rightarrow \infty$ strebt die Breite der Dichteverteilung gegen einen endlichen Wert. Auf der anderen Seite ist mit wachsendem L das Minimum der Potentiallandschaft immer weiter vom Rand bzw. dem Gitterpunkt $L \in \mathcal{S}$ entfernt. Der Wert $\langle \lambda_{max}^{(0)} | L \rangle$ liegt folglich in den Rändern der Dichteverteilung. Die Endlichkeit der Verteilung bei $L \rightarrow \infty$ erfordert, daß $\langle \lambda_{max}^{(0)} | L \rangle$ schneller als L^{-3} fällt⁹, während die Störungsrechnung ein stärkeres Abfallen gemäß Gleichung (5.41) mit $e^{-\sqrt{L}}$ voraussetzt. Ein Abfall wie bei der Gaußverteilung mit e^{-L^2} würde beispielsweise die Bedingung erfüllen.

Gleichung (5.41) liefert also eine Forderung an die Stärke der Lokalisierung der stationären Dichte, wenn die Störungsrechnung eine vernünftige Näherung für die Entweichrate $\gamma(L)$ darstellen soll. Für die Bestimmung des Exponenten β ist es jedoch aufgrund der Mittelung über viele Unordnungsrealisierungen nicht erforderlich, daß die Bedingung (5.37) immer erfüllt ist. Zum einen werden sehr stark falsch bestimmte Korrekturen $\lambda_{max,i}^{(1)}$ zu klein geschätzt¹⁰ und beeinflussen damit den Mittelwert $-\overline{\log \gamma(L)} = -\frac{1}{N} \sum_i \log \gamma_i(L)$ mit $\gamma_i(L) = -\lambda_{max,i}^{(1)}$ kaum. Zum anderen ist für die Bestimmung des Exponenten β aus der Störungsrechnung weniger entscheidend, wie weit die Störungsrechnung danebenliegt, sondern daß im Mittel die Größe $-\overline{\log \gamma(L)}$ um einen konstanten Faktor unterschätzt wird. In der doppellogarithmischen Darstellung wie in den vorherigen Abschnitten wird hierdurch die $-\overline{\log \gamma(L)}$ -Kurve lediglich parallel verschoben, der Exponent β selbst bleibt dabei als Anstieg unverändert. Die Abbildungen 5.6 und 5.10 legen jedenfalls ein solches Verhalten der Störungsrechnung nahe, die Überlegungen aus Abschnitt 5.2.1 liefern den Nachweis für die Sinai-Unordnung.

Zur korrekten Ermittlung des Exponenten β müssen also die Abweichungen der Störungsrechnung vom exakten Ergebnis bei den betrachteten Systemgrößen L unabhängig vom konkreten Wert für $-\log \gamma(L)$ sein. Dies wird in Abb. 5.9 untersucht. Die linke Grafik zeigt als Funktion von L , wie oft für ein System mit Sinai-Unordnung bei 1000 Realisierungen von \mathbf{P}_∞ der Quotient aus Gleichung (5.37) für $\lambda_m^{(0)} = \lambda_{sec}^{(0)}$ größer als eins wird.¹¹ Unabhängig von b und $L > 50$ pendelt dies um etwa 530. Zum Vergleich ist auch aufgetragen, wie oft die numerische Bestimmung des maximalen Eigenwertes λ_{max} scheiterte, da λ_{max} so groß wurde, daß es im Rahmen der Maschinengenauigkeit nicht mehr von eins unterschieden werden konnte. Diese Zahl ist zum einen natürlich abhängig von der Größe L der Übergangsmatrizen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ und nimmt bei Annäherung an den symmetrischen Fall, d. h. für steigende b , ab. Sonst zeigt sich aber keine Korrelation mit der Fehlerhäufigkeit der Störungsrechnung. Für eine konkrete Realisierung von \mathbf{P}_∞ ergibt der Vergleich von direkter Bestimmung der Entweichrate $\gamma(L) = -\log \lambda_{max}$ aus dem maximalen Eigenwert λ_{max} der Matrix $\mathbf{Q}^{L \times L}$ und Störungsrechnung die rechte Grafik in Abb. 5.9. Es ist deutlich zu erkennen, wie die Störungsrechnung in unregelmäßigen Abständen in L und vor allem unabhängig vom konkreten Wert von $-\log \gamma(L)$ „versagt“ und dann sichtlich zu kleine Werte für $-\log \gamma(L)$ liefert.

⁹Für die Endlichkeit des zweiten Moments muß

$$\infty > \int_0^\infty x^2 x^\alpha dx = \frac{x^{3+\alpha}}{3+\alpha} \Big|_c^\infty$$

sein. Dies ist nur möglich für $\alpha < -3$

¹⁰Die Störungsrechnung erster Ordnung für den maximalen Eigenwert ist gemäß Gleichung (5.20) immer negativ.

¹¹Für die Berechnung der linken Grafik von Abb. 5.9 wurde wiederum die Transformation der Übergangsmatrix der Sinai-Unordnung auf symmetrische Tridiagonalgestalt ausgenutzt (s. Abschnitt 4.3.1). Diese ändert die Skalarprodukte in Gleichung (5.37) nicht, da sowohl \mathbf{Q} als auch die Transformationsmatrizen \mathbf{S} bzw. $\mathbf{S}^{(-1)}$ Diagonalmatrizen sind. Für die allgemeine binäre Unordnung ist die Berechnung erheblich zeitaufwendiger.

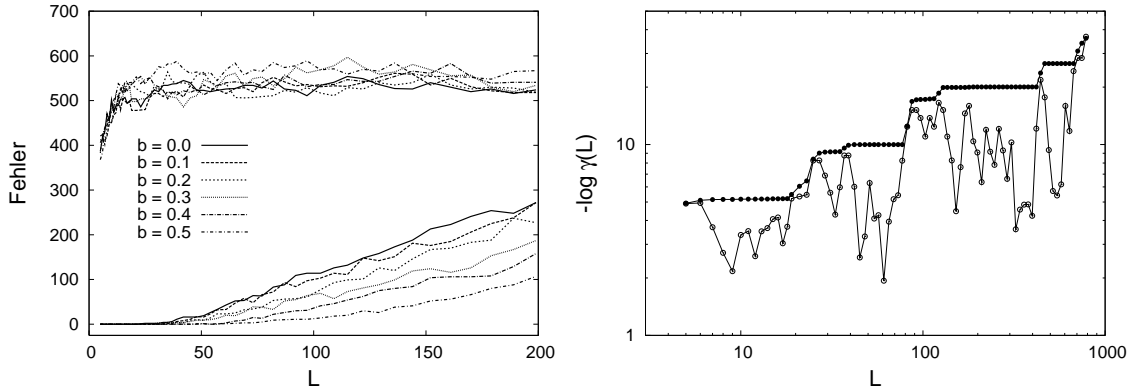


Abbildung 5.9: Links: Es wurden je 1000 Realisierungen von \mathbf{P}_∞ mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{10}, b, \frac{9}{10} - b\}$ ausgewertet. Oben ist die Anzahl der Fälle mit $|\frac{\langle \lambda_{max}^{(0)} | \hat{\mathbf{Q}} | \lambda_{sec}^{(0)} \rangle}{\lambda_{max}^{(0)} - \lambda_{sec}^{(0)}}| \geq 1$ zu sehen. Unten ist die Anzahl der Fälle aufgetragen, in denen der maximale Eigenwert λ_{max} der Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ aufgrund des Erreichens der Maschinengenauigkeit zu $\lambda_{max} = 1$ bestimmt wurde. Rechts: Die Entweichrate $\gamma(L)$ bzw. $-\log \gamma(L)$ ist als Ergebnis der Bestimmung des maximalen Eigenwertes $\gamma(L) = -\log \lambda_{max}$ (volle Punkte) und als Ergebnis der Störungsrechnung (leere Quadrate) für eine Unordnungsrealisierung gemäß Gleichung (5.3) mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{10}, \frac{5}{10}, \frac{4}{10}\}$ dargestellt.

5.2.4 Verallgemeinerte binäre Unordnung

Bei Vorliegen verallgemeinerter binärer Unordnung können weder das Potential (2.22) noch die Zustandssumme (2.23) über die detaillierte Balance definiert werden, wodurch die Gültigkeit der Störungsrechnung für die Bestimmung des Exponenten β nicht wie in Abschnitt 5.2.1 gezeigt werden kann. Es verbleibt nur der Vergleich der numerischen Ergebnisse von Störungsrechnung und direkter Bestimmung der Entweichrate $\gamma(L)$ aus dem maximalen Eigenwert λ_{max} der Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$, wie er auch schon in Abb. 5.6 für die Sinai-Unordnung durchgeführt wurde. Abb. 5.10 zeigt zwei Beispiele mit verallgemeinerter binärer Unordnung. Wie bereits in Abb. 5.6 schwankt der Exponent β als Ergebnis der Störungsrechnung deutlich stärker, stimmt aber gut mit dem aus den maximalen Eigenwerten λ_{max} der Übergangsmatrix \mathbf{Q} berechneten β überein. Auffällig ist ferner, daß alle Varianten zur Berechnung der unordnungsgemittelten Entweichrate nur für deutlich kleinere Werte von $-\log \gamma(L)$ als bei der Sinai-Unordnung zuverlässige Ergebnisse liefern. Verantwortlich ist dafür die stärkere Streuung der einzelnen Beiträge $\log \gamma_i(L)$ zum Unordnungsmittel $-\log \gamma(L) = -\frac{1}{N} \sum_i^N \log \gamma_i(L)$. Damit wird häufiger die Grenze der Rechengenauigkeit erreicht, was das Unordnungsmittel verfälscht.

5.3 Präasymptotisches Verhalten

In diesem Abschnitt soll das präasymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ bzw. von $-\log \gamma(L)$ untersucht werden, das erst mit Hilfe der Störungsrechnung einer Beobachtung zugänglich ist, da sie die Bestimmung der Größe $-\log \gamma(L)$ auch für sehr große L ermöglicht.

Sinai-Unordnung Zunächst soll dies für die Sinai-Unordnung genauer betrachtet werden. Für den Wert von $-\log \gamma(L)$ als Ergebnis der Störungsrechnung ist laut Gleichung (5.23) die Größe $\overline{\log Z_L}$ mit der Zustandssumme Z_L maßgeblich. Dieser Ausdruck wurde in [65]

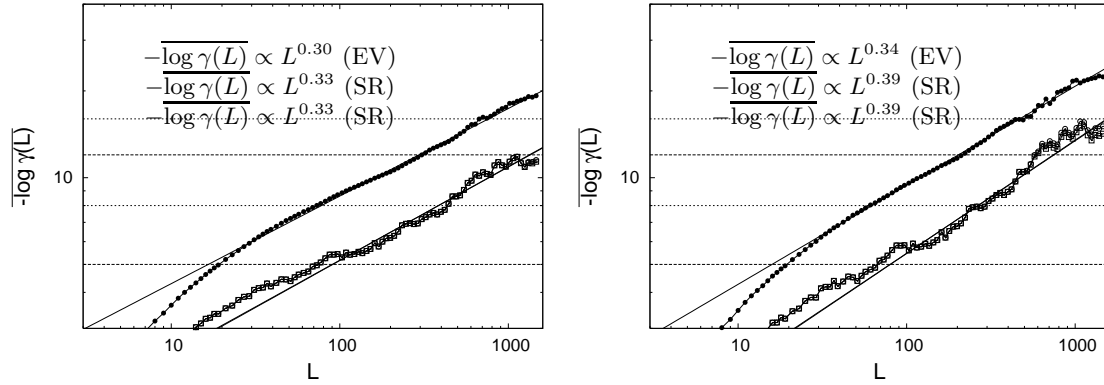


Abbildung 5.10: Entweichrate $\gamma(L) = -\log \lambda_{\max}$ bzw. $-\log \gamma(L)$ als Ergebnis der direkten Berechnung des maximalen Eigenwertes λ_{\max} der Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ (EV, volle Punkte) und als Ergebnis der Störungsrechnung (SR, leere Quadrate) für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{3}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ (links), $\mathbf{p} = \{\frac{1}{2}, \frac{1}{6}, 0, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ (rechts). Jeder Datenpunkt ist dabei das Ergebnis der Mittelung über 50 Realisierungen von \mathbf{P}_∞ , Gleichung (5.3). Die Störungsrechnung wurde wie in Abb. 5.6 für dieselben Übergangsmatrizen auf zwei unterschiedliche Arten durchgeführt und der Exponent β als Anstieg zwischen $8 \leq -\log \gamma(L) \leq 16$ (volle Punkte) bzw. $5 \leq -\log \gamma(L) \leq 12$ (leere Quadrate) bestimmt.

zu

$$\begin{aligned} \overline{\log Z_L} &= -\log \alpha + \gamma_{\text{Euler}} + 2\sqrt{\frac{\alpha L}{\pi}} + \\ &+ \frac{2}{\sqrt{\alpha L \pi}} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\exp[-2R\sqrt{\alpha L}]}^1 \exp\left[-\frac{\log^2 x}{4\alpha}\right] \frac{\log(1-x)}{x} dx \end{aligned} \quad (5.42)$$

bestimmt. Der Parameter α ist mit der Stärke der Unordnung verknüpft, $\gamma_{\text{Euler}} = 0.5772 \dots$ bezeichnet die Euler-Konstante. Für verschiedene Werte von α zeigt Abb. 5.11 (links) die Größe $\overline{\log Z_L}$ laut Gleichung (5.42) als Funktion von L . Zum Vergleich sind in der Darstellung auch die Funktionen $L^{\frac{1}{2}}$ und $\log L$ angegeben, die den Grenzfall $L \rightarrow \infty$ für die Sinai-Unordnung bzw. das Ergebnis im symmetrischen Fall mit Störungsrechnung, siehe Gleichung (5.35), bilden. Der Abbildung ist zu entnehmen, daß sich die Größe $\overline{\log Z_L}$ mit fallendem Parameter α länger wie die Funktion $\log L$ verhält, ehe sie proportional zu $L^{\frac{1}{2}}$ verläuft.

Die rechte Grafik von Abb. 5.11 zeigt für das Mittel $-\log \gamma(L)$ als Ergebnis der Störungsrechnung bereits bei sehr kleinen L einen Verlauf wie die Größe $\overline{\log Z_L}$. Die ausgewählten, fast symmetrischen Systeme folgen somit auch über einen großen Bereich von L dem symmetrischen Fall mit Störungsrechnung ($\gamma(L) \propto L^{-1}$). Wenn das Mittel $-\log \gamma(L)$ über die maximalen Eigenwerte λ_{\max} der Übergangsmatrizen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ bestimmt wird, so verhält sich $-\log \gamma(L)$ ebenfalls für einen großen Bereich wie im symmetrischen Fall mit $\gamma(L) \propto L^{-2}$. Das Verfahren ist allerdings auf kleinere L als bei der Störungsrechnung beschränkt, wodurch das Einschwenken auf einen Verlauf proportional zu $L^{\frac{1}{2}}$ nur ansatzweise zu erkennen ist.

Verallgemeinerte binäre Unordnung Für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit dem Parametersatz $\mathbf{p}(\kappa) = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ zeigt Abb. 5.12 (links) das Mittel $-\log \gamma(L)$ als Ergebnis der Störungsrechnung bis hin zu großen L . Bis auf $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{6})$, wo das System symmetrisch wird, ist allen Graphen gemein, daß der Anstieg in der gewählten doppellogarithmischen Darstellung ab einem spezifischen L^* deutlich steigt. Der Übergang

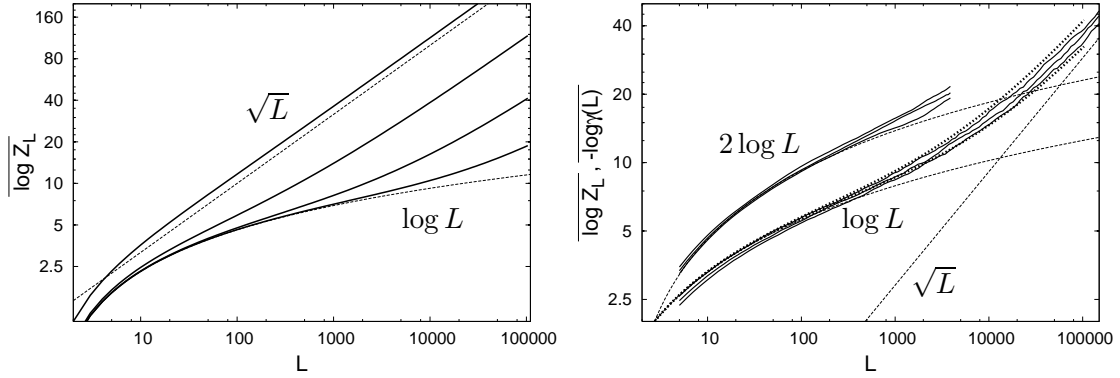


Abbildung 5.11: Links: Es sind die Größe $\overline{\log Z_L}$ von unten nach oben mit $\alpha = \frac{1}{1000}, \frac{1}{100}, \frac{1}{10}, 1$ und zusätzlich die Funktionen $\log L$ und $L^{\frac{1}{2}}$ dargestellt. Rechts: Die durchgezogenen Linien zeigen das Mittel $-\log \gamma(L)$ für drei Sätze von Übergangswahrscheinlichkeiten in der Nähe des geordneten Falles (d.h. $\mathbf{p} = \{\frac{7}{20}, \frac{5}{20}, \frac{8}{20}\}$, $\mathbf{p} = \{\frac{8}{20}, \frac{3}{20}, \frac{9}{20}\}$ und $\mathbf{p} = \{\frac{10}{20}, \frac{1}{20}, \frac{9}{20}\}$), unten als Ergebnis der Störungsrechnung, oben aus der Berechnung des maximalen Eigenwertes der Übergangsmatrix. Dick gepunktet sind die Funktionen $\overline{\log Z_L}$ mit $a = \frac{1}{10}$ und $a = \frac{5}{100}$ angegeben, sowie dünn gestrichelt die Funktionen $L^{\frac{1}{2}}$, $\log L$ und $2 \log L$. Die nicht durchgezogenen Kurven wurden entsprechend verschoben.

ist dabei erheblich ausgeprägter als für die Sinai-Unordnung in Abb. 5.11 und auch für Unordnungsumgebungen weit weg vom symmetrischen Fall zu beobachten. Für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{24})$ und $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{4})$ ist dies noch einmal detailliert in Abb. 5.13 dargestellt. Hierbei ist überdies zu erkennen, daß sich sowohl für $L < L^*$ als auch $L > L^*$ eine Beziehung $-\log(\gamma(L)) \propto L^{\beta_{pre}}$ bzw. $-\log(\gamma(L)) \propto L^{\beta_{asy}}$ definieren läßt, wobei der Übergang bei L^* abrupt erfolgt. Die Abbildung legt somit einen ausgedehnten präasymptotischen Bereich mit $\beta = \beta_{pre}$ und damit einem leicht von der Sinai-Unordnung abweichenden Verhalten nahe.

Die Abhängigkeit des Exponenten β im präasymptotischen (β_{pre}^{-1}) und im asymptotischen Bereich (β_{asy}^{-1}) von der Wahl der Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}(\kappa)$ ist in Abb. 5.12 (rechts) dargestellt. Für jeden einzelnen Satz $\mathbf{p}(\kappa)$ wurde dabei wie in Abb. 5.13 verfahren. Die Abbildung 5.12 (rechts) zeigt, daß der Exponent β_{pre}^{-1} mit den β_{ev}^{-1} -Werten aus der Bestimmung des maximalen Eigenwertes λ_{max} von $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$, der prinzipbedingt nur für kleine L , also insbesondere $L < L^*$, durchgeführt werden kann, zusammenfällt. Beide weichen bei Annäherung an den symmetrischen Fall bei $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{6})$ sichtlich vom asymptotischen Verhalten der Sinai-Unordnung mit $\beta^{-1} = 2$ ab. Für $L > L^*$ stellt sich hingegen als Ergebnis der Störungsrechnung mit $\beta_{asy}^{-1} \approx 2$ das von der Sinai-Unordnung bekannte Verhalten für die Entweichrate ein.

Daß jedes System auf einer hinreichend kleinen Längenskala wie ein diffusives System, gegebenenfalls mit einer lokalen Drift v , aussieht, legt nahe, daß der präasymptotische Bereich auch gut durch eine Kombination der Gleichungen (5.5) und (5.30) beschrieben werden kann:

$$\gamma(L) \propto L^\eta \exp[-b \cdot L^\beta] \quad (5.43)$$

Man könnte sogar erwarten, daß $\eta = -2$ und $\beta = \frac{1}{2}$ gilt. In Abb. 5.14 wird dies untersucht. Betrachtet man zunächst die linke Grafik, die die Größe $\overline{\log \gamma(L)}$ als Funktion von $\log L$ mit der Regression $\gamma(L) \propto L^\eta$ für kleine L zeigt, so wird das diffusive Verhalten für kleine Systemgrößen L von $-\log(L) \propto L^{-2}$ deutlich unterstrichen. Die rechte Grafik zeigt dasselbe System mit der Regression (5.43) als gestrichelte Linie. Die Regressionskoeffizienten sind hierbei $\eta = -1.93$ und $\beta = 0.67$, womit die Regression eine überzeugende Koinzidenz mit den Datenpunkten zeigt. Allerdings ist die Regression nichtlinear, was zu Problemen

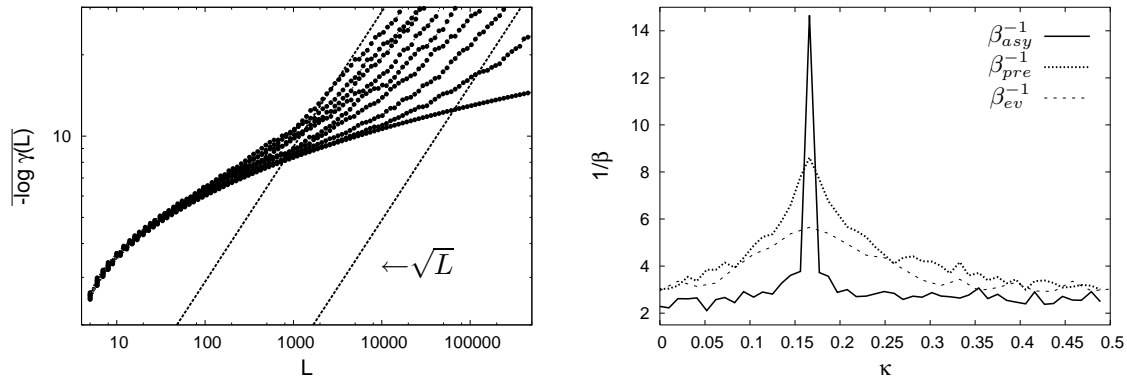


Abbildung 5.12: Links: Das Mittel $-\log \gamma(L)$ wurde mit der Störungsrechnung für Systeme mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ bestimmt, wobei κ von 0 bis zum symmetrischen Fall mit $\kappa = \frac{1}{6}$ in $\frac{1}{48}$ -Schritten von links nach rechts läuft. Das Unordnungsmittel wurde dabei über jeweils 250 Realisierungen von \mathbf{P}_∞ gebildet. Die beiden Geraden in der Grafik geben das (asymptotische) Verhalten der Sinai-Unordnung mit $-\log \gamma(L) \propto \sqrt{L}$ wieder. Rechts: Es sind die wie in Abb. 5.13 bestimmten Exponenten β_{pre}^{-1} für $L < L^*$ bzw. β_{asy}^{-1} für $L > L^*$ und die Exponenten β_{ev}^{-1} aus der Berechnung des maximalen Eigenwertes, Abschnitt 5.1.2, für $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ vergleichend dargestellt. Bei $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{6})$ gilt $\beta = 0$.

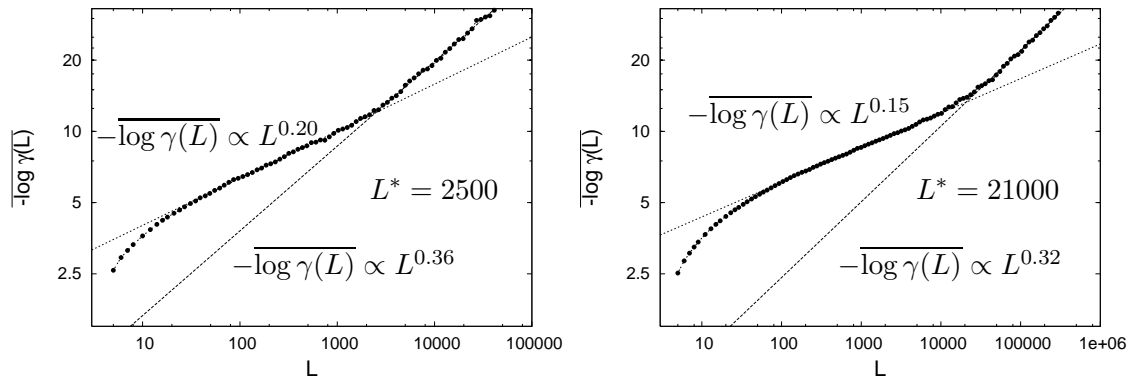


Abbildung 5.13: In beiden Grafiken wurde sowohl für kleine als auch für große L eine Regression mit $-\log \gamma(L) \propto L^\beta$ für die mit der Störungsrechnung bestimmten Datenpunkte durchgeführt. Die Werte der Exponenten β sind jeweils unten bzw. oben in den Grafiken angegeben. Der Punkt L^* ist der Schnittpunkt der beiden Geraden, bei dem sich das Verhalten des Mittels $-\log \gamma(L)$ abrupt ändert. Den Datenpunkten liegen jeweils 250 Realisierungen der Matrix \mathbf{P}_∞ zugrunde, der Parametersatz ist $\mathbf{p} = \{\frac{1}{24}, \frac{1}{6}, \frac{11}{24}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ (links) bzw. $\mathbf{p} = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ (rechts).

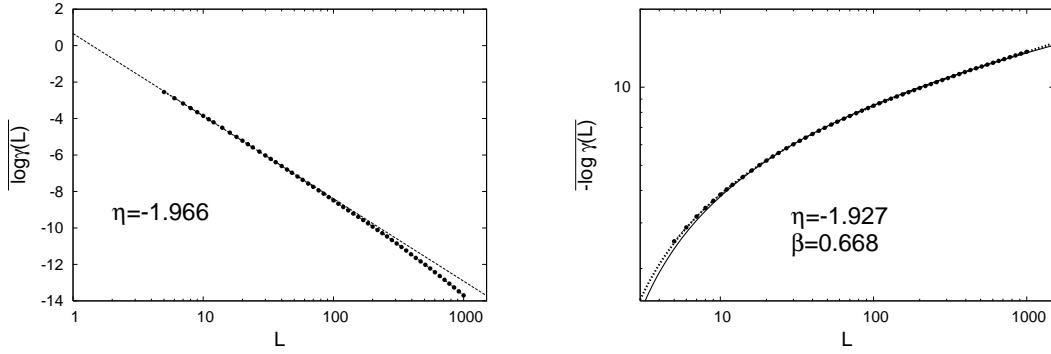


Abbildung 5.14: In beiden Grafiken wurde das Mittel $-\overline{\log \gamma(L)}$ mit $\gamma(L) = -\log \lambda_{max}$ über die maximalen Eigenwerte λ_{max} der Matrizen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $\mathbf{p} = \{\frac{5}{24}, \frac{1}{6}, \frac{7}{24}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ bestimmt. Die linke Grafik zeigt mit der Regression $\gamma(L) \propto L^\eta$ für kleine L , daß sich kleine Systeme diffusiv verhalten. In der rechten Grafik wurde die Regression (5.43) (gestrichelt) durchgeführt. Als Vergleich ist $L^{-2} \exp[-b\sqrt{L}]$ dargestellt. Die Unterschiede sind marginal.

in der Bestimmung von η und β führt. Dies läßt sich bspw. daran ablesen, daß eine Regression $\gamma(L) \propto L^{-2} \exp[-L^{0.5}]$ (durchgezogene Linie) kaum hiervon zu unterscheiden ist. Zu beachten ist ferner, daß die Darstellung nur typisch ist für Systeme in der Nähe des symmetrischen Falls $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{6})$. Mit wachsendem Abstand von $\mathbf{p}(\kappa = \frac{1}{6})$ stellt Gleichung (5.43) mit $\eta = -2$ und $\beta = \frac{1}{2}$ nicht mehr eine so gute Regression dar.

6 Stationäre Dichte

Die stationäre Dichte $\langle \pi |$ bzw. ihr Logarithmus $\langle \log \pi | = \sum_i \log \pi_i \langle i |$ ist entscheidend für das Ergebnis der Störungsrechnung. Sie soll in diesem Kapitel eingehender insbesondere daraufhin untersucht werden, ob sich weitere Indikatoren für den Knick im Verhalten von $-\log \gamma(L)$ finden. Es sei noch einmal vermerkt, daß $\langle \log \pi |$ für die Sinai-Unordnung über die detaillierte Balance direkt bestimmt werden kann und dort das für die Bewegung maßgebliche assoziierte Potential V_i bezeichnet. Für die verallgemeinerte Unordnung läßt sich V_i im Sinne von Gleichung (2.22) nicht definieren, wie in Abschnitt 3.1 diskutiert, übernimmt jedoch $\langle \log \pi |$ offenbar die gleiche Rolle. Die nachstehenden Untersuchungen betrachten daher den Logarithmus der stationären Dichte, zumal für die Sinai-Unordnung $\langle \log \pi |$ im Kontinuumsmites selbst den Pfad eines Random walk mit entsprechend bekannten Eigenschaften darstellt.

6.1 Numerische Bestimmung

Die Berechnung der stationären Dichte $\langle \pi |$ bzw. des hierüber definierten Potentials $\pi_i = \pi_1 e^{-V_i}$ (s. Abschnitt 2.1.3) kann bei der Sinai-Unordnung iterativ durchgeführt werden, was bereits in Abschnitt 5.2.1 beschrieben wurde. Für Systeme mit Nächstnachbarübergängen ist dieses auf der Gültigkeit von detaillierter Balance basierende Vorgehen nicht möglich, und es muß das Gleichungssystem

$$\mathbf{P}^T | \pi \rangle = | \pi \rangle \rightarrow (\mathbf{P} - \mathbf{I})^T | \pi \rangle = 0 \cdot | \pi \rangle \quad (6.1)$$

mit der Normierung $\langle \eta | \pi \rangle = 1$, $\langle \eta | = \sum_i \langle i |$, und $\mathbf{P}^T \in \mathbb{R}^{L \times L}$ gelöst werden. Laut Stewart [69] gibt es zur Lösung des homogenen Gleichungssystems (6.1) vier Möglichkeiten:

1. Der sogenannte *zero pivot*¹-Ansatz erfordert zuerst die **LU**-Zerlegung von $(\mathbf{P} - \mathbf{I})^T$. Das Gleichungssystem ist unterbestimmt, so daß ein Eintrag frei gewählt werden kann. Dies wird durch $\langle L | \mathbf{U} | L \rangle = 1$ und $\mathbf{U} | \pi \rangle = \nu | L \rangle$ mit einer beliebigen von null verschiedenen Zahl ν realisiert.
2. Die zweite Möglichkeit besteht darin, direkt die letzte Zeile in Gleichung (6.1) durch die Normierungsbedingung zu ersetzen. Dies ist jedoch nicht zu empfehlen, da das System dann schlecht konditioniert wird.
3. Es ist ebenfalls möglich, eine Spalte der Matrix $(\mathbf{P} - \mathbf{I})^T$ auf die rechte Seite zu bringen und das verbliebene System von $L - 1$ Gleichungen zu lösen. Der zu der entsprechenden Spalte gehörende Eintrag von $| \pi \rangle$ wird dabei eins gesetzt.
4. Das vierte Verfahren nutzt das Schema der inversen Iteration, bei dem

$$| \pi^{(k+1)} \rangle = (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I}) | \pi^{(k)} \rangle \quad (6.2)$$

schnell gegen den Eigenvektor von \mathbf{A} konvergiert, dessen zugehöriger Eigenwert λ der Zahl μ am nächsten liegt. Ist $\lambda = \mu$, so konvergiert das Verfahren bereits im

¹Das Pivotelement bezeichnet dasjenige Element einer Matrix, das als erstes von einem Algorithmus für die weitere Berechnung ausgewählt wird.

ersten Schritt. Ersetzt man \mathbf{A} durch $(\mathbf{P} - \mathbf{I})^T$ und μ durch null, ergibt sich

$$(\mathbf{P} - \mathbf{I})^T | \pi^{(k)} \rangle = | \pi^{(k-1)} \rangle \quad (6.3)$$

wobei nur der erste Iterationsschritt auszuführen ist. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, ist zweckmäßigerweise $| \pi^{(0)} \rangle = | L \rangle$ zu setzen. Nach der **LU**-Zerlegung ist wiederum das verschwindende Pivotelement durch die Maschinengenauigkeit zu überschreiben.²

Für die folgenden Untersuchungen wird die vierte Variante genutzt, in Kapitel 5 kamen die Varianten 1, 3, und 4 zum Einsatz.

6.2 Sinai-Unordnung

Wie in Abschnitt 2.1.3 diskutiert, können das assoziierte Potential V_i und damit $\log \pi_i$ als Trajektorie eines diskreten symmetrischen Random walk mit abhängigen Zuwächsen betrachtet werden. Für hinreichend große L ist dennoch die Zufallsvariable $Y(L) = \log \frac{\pi_L}{\pi_1}$ gaußverteilt um null, wodurch die Standardabweichung $\sigma(L)$ von $Y(L)$ mit \sqrt{L} wächst. Die geraden zentralen Momente $m_{2n}(L)$, $n \in \mathbb{N}$, der Gaußverteilung sind durch

$$m_{2n} = \overline{(Y - \bar{Y})^{2n}} = \sigma^{2n} (2n - 1)!! \propto L^n \quad (6.4)$$

gegeben, während alle ungeraden zentralen Momente $m_{2n-1} = \overline{(Y - \bar{Y})^{2n-1}}$ verschwinden. Die zweite Kumulante von $Y(L)$ ist σ^2 , alle anderen Kumulanten sind null.³ Ein weiteres Maß, um die Verteilung zu charakterisieren, ist die Wölbung (*kurtosis*), die angibt, wieviel Wahrscheinlichkeitsmasse in den Rändern der Verteilung konzentriert ist. Sie ist durch

$$\mu_{kurt} = \frac{m_4}{\sigma^4} - 3 \quad (6.5)$$

definiert und verschwindet für $Y(L)$ ebenso wie die Schiefe (*skewness*) μ_{skew} ,

$$\mu_{skew} = \frac{m_3}{\sigma^3} \quad (6.6)$$

die die Abweichung von einer symmetrischen Verteilung charakterisiert.

Wie erwähnt, sind die Zuwächse zu V_i bzw. $\log \pi_i$ nicht unabhängig. Die Reichweite und Stärke der Korrelationen werden über die Autokovarianzfunktion von $\Delta_i = \log \pi_{i+1} - \log \pi_i$ bestimmt. Gemäß Gleichung (2.22) ist Δ_i durch

$$\Delta_i = \log \frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}} \quad (6.7)$$

gegeben. Für die Autokovarianz $C(l) = Cov(\Delta_i, \Delta_{i-l})$,

$$C(l) = \overline{(\Delta_i - \bar{\Delta}_i)(\Delta_{i-l} - \bar{\Delta}_{i-l})} \quad (6.8)$$

wird der Erwartungswert von Δ_i benötigt. Betrachtet man den binären Fall mit Sinai-Unordnung, Gleichung (2.16), bei dem die Übergangswahrscheinlichkeiten \mathbf{p} und $\bar{\mathbf{p}}$ unabhängig für jeden Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$ mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ gewählt werden, lassen sich leicht konkrete Werte berechnen. Aus der Unabhängigkeit von $p_{i,i+1}$ und $p_{i+1,i}$ und

²Die Maschinengenauigkeit ist die kleinste Zahl ϵ , für die $1 + \epsilon$ noch von 1 unterschieden werden kann.

³Durch die Angabe aller Momente bzw. aller Kumulanten ist eine Wahrscheinlichkeitsverteilung eindeutig bestimmt.

aus $\log \frac{a^+}{a^-} = -\log \frac{a^-}{a^+}$ folgt, daß $\overline{\Delta_i}$ verschwindet. Mit denselben Argumenten ist offensichtlich, daß $C(l)$ für alle $|l| \geq 2$ null wird, da nur unabhängige $p_{i,j}$ im Produkt zwischen Δ_i und Δ_{i-l} vorkommen. Es verbleibt somit die Berechnung von $C(0)$ und $C(\pm 1)$. Mit den vorangegangenen Überlegungen ergibt sich für $C(0)$ (bzw. die Varianz von Δ_i)

$$C(0) = \overline{(\Delta_i)^2} = \overline{\log^2 \left[\frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}} \right]} = \frac{1}{2} \left(\log \frac{a^+}{a^-} \right)^2 \quad (6.9)$$

Für $C(\pm 1)$ folgt

$$C(\pm 1) = \overline{\Delta_i \cdot \Delta_{i\mp 1}} = \overline{\log \left(\frac{p_{i,i+1}}{p_{i+1,i}} \right) \cdot \log \left(\frac{p_{i\mp 1,i}}{p_{i,i\mp 1}} \right)} = \frac{1}{4} \left(\log \frac{a^+}{a^-} \right)^2 \quad (6.10)$$

Abschließend soll noch die Leistungsspektraldichte $\hat{x}(\omega)$ von Δ_i betrachtet werden, die durch die Fouriertransformierte von $C(l)$ ausgedrückt werden kann. Für den binären Fall ergibt sich

$$\hat{x}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} C(l) e^{-i\omega l} \quad (6.11)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{2} \left(\log \frac{a^+}{a^-} \right)^2 \left(1 + \frac{e^{i\omega} + e^{-i\omega}}{2} \right) \right) \quad (6.12)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\log \frac{a^+}{a^-} \right)^2 (1 + \cos \omega) \quad (6.13)$$

6.3 Verallgemeinerte binäre Unordnung

Die stochastische Variable $Y(L) = \log \frac{\pi_L}{\pi_1}$ ist bei der verallgemeinerten binären Unordnung kein Potential mehr, aber weiterhin der Pfad eines Random walk, für den die gleichen Größen wie im vorangegangenen Abschnitt untersucht werden sollen.

Zu Beginn soll die L -Abhängigkeit der Varianz $\sigma^2(L)$ und der Momente m_2 und m_4 untersucht werden, für die ein typisches Beispiel mit der linken Grafik von Abb. 6.1 gegeben ist. Die Größen $\sigma(L)$, $\sqrt{m_2}$ und $\sqrt[4]{m_4}$ zeigen alle ein Verhalten proportional zu L^ν mit $\nu \approx \frac{1}{2}$ - mit Ausnahme sehr kleiner Systemgrößen L . In der rechten Grafik von Abb. 6.1 wurde in den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}(\kappa) = \{\kappa, \frac{1}{6}, p_{i,i}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ der Parameter κ variiert und jeweils der Exponent ν bestimmt. Auch hierbei zeigen die Größen $\sigma(L)$, $\sqrt{m_2}$ und $\sqrt[4]{m_4}$ kein sichtliches Abweichen vom Sinai-Verhalten mit $\nu = \frac{1}{2}$.

Schiefe μ_{skew} und Wölbung μ_{kurt} , für die Abb. 6.2 (links) ein typisches Beispiel zeigt, gehen für hinreichend große L gegen null und weichen damit ebenfalls nicht merklich vom Sinai-Verhalten ab, wo $Y(L)$ asymptotisch gaußverteilt ist. Insbesondere zeigen sich sowohl bei der Schiefe μ_{skew} als auch bei der Wölbung μ_{kurt} keine Änderungen in der Nähe von L^* , wo der abrupte Übergang in Abschnitt 5.3 beobachtet wurde. Die Abweichungen am rechten Rand der Grafik sind lediglich ein Effekt der dort erreichten Maschinengenauigkeit, was bereits in Abschnitt 5.2.4 diskutiert wurde und hier dargestellt ist, da das Erreichen der Grenzen der Numerik an dieser Stelle nicht unbedingt zu erwarten ist und somit zu falschen Schlußfolgerungen verleitet.

Daß die Gaußverteilung eine gute Approximation für die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $Y(L)$ darstellt, wird auch durch Abb. 6.3 unterstrichen. Auf Basis von 25000 Realisierungen von $Y(L)$ wurde hierbei die Dichteverteilung für ein vergleichsweise kleines L (linke Grafik) und ein deutlich größeren Wert von L (rechte Grafik) dargestellt. In der linken Grafik ist dabei noch deutlich in den Wellen das diskrete Spektrum der für $Y(L = 51)$

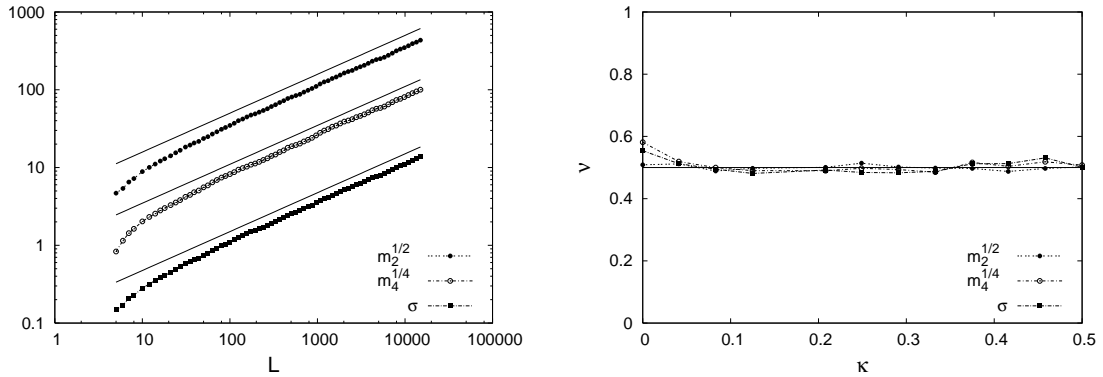


Abbildung 6.1: Links: Doppellogarithmische Darstellung der Standardabweichung $\sigma(L)$ und der Momente m_2 und m_4 von $Y(L)$ für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{4}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Die Größen wurden aus jeweils 1000 Unordnungsrealisierungen für jeden Datenpunkt bestimmt, die Geraden zeigen Funktionen proportional zu \sqrt{L} . Rechts: Für die Größen σ , $\sqrt{m_2}$ und $\sqrt[4]{m_4}$ wie links wurden Regressionen mit L^ν für verschiedene Systemparameter $\mathbf{p} = \{\kappa, \frac{1}{6}, p_{i,i}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ gebildet. Es sind keine deutlichen Abweichungen von $\nu = \frac{1}{2}$ (Sinai) zu erkennen.

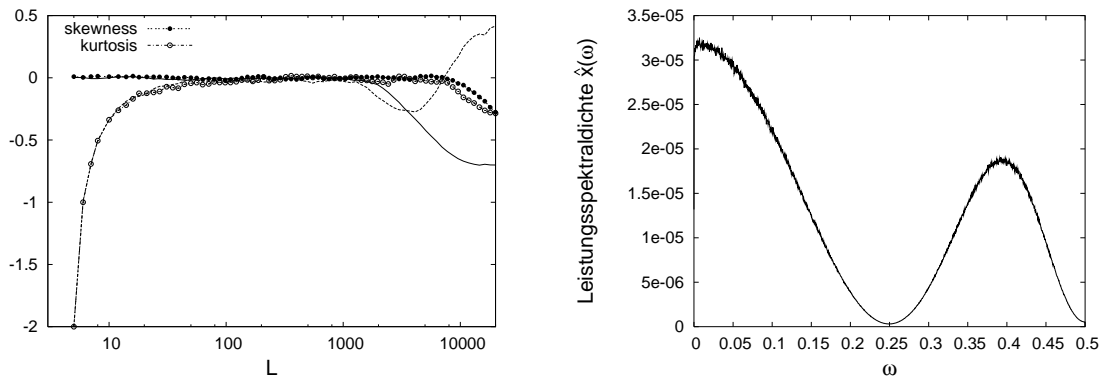


Abbildung 6.2: Schiefe μ_{skew} und Wölbung μ_{kurt} (links) und die Leistungsspektraldichte $\hat{x}(\omega)$ (rechts) für $\mathbf{p} = \{\frac{1}{12}, \frac{1}{6}, \frac{5}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Links: Die dünnen Linien zeigen das Ergebnis für die Berechnung mit geringer und die Punkte das Ergebnis für größere Maschinengenauigkeit, woran zu erkennen ist, daß die Abweichungen von null für große L lediglich eine Folge der begrenzten Gleitkommazahldarstellung sind. Rechts: Bei für das Langzeitverhalten maßgeblichen kleinen Werten von ω zeigt die Leistungsspektraldichte $\hat{x}(\omega)$ das Cosinus-Verhalten wie bei der Sinai-Unordnung.

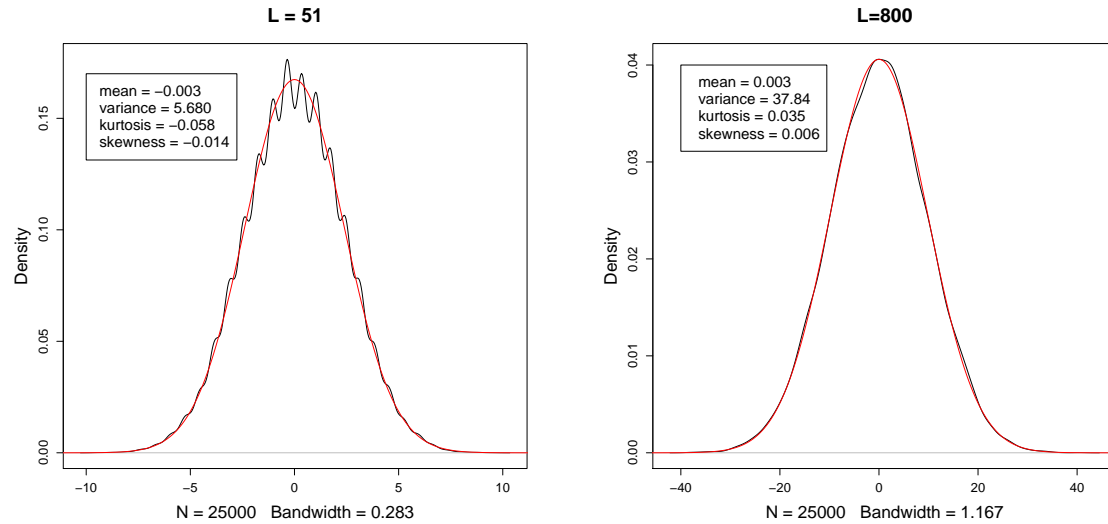


Abbildung 6.3: Die Dichtefunktion wurde mit Hilfe des Statistikprogrammes R über jeweils 25000 Unordnungsrealisierungen für $Y(L = 51)$ (links) und $Y(L = 800)$ (rechts) als kontinuierliche Funktion approximiert und ist als schwarze Linie dargestellt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind dabei die gleichen wie schon in Abb. 6.1 (links) und Abb. 6.2, nämlich $\mathbf{p} = \{\frac{1}{12}, \frac{1}{6}, \frac{5}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$. Die roten Kurven zeigen in beiden Grafiken eine Gaußverteilung mit gleicher Varianz wie bei den schwarzen Kurven und Mittelwert Null.

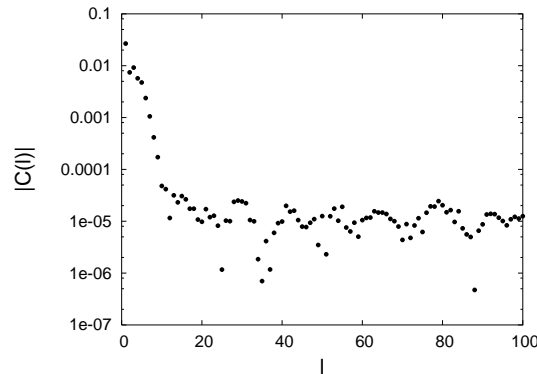


Abbildung 6.4: Die Autokorrelation $C(l)$ zerfällt bereits nach zehn Schritten für ein System mit den Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p} = \{\frac{1}{12}, \frac{1}{6}, \frac{5}{12}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ zu einem Hintergrundrauschen.

möglichen Werte zu erkennen. Die rote Kurve zeigt, wie eine Gaußverteilung mit Mittelwert null und gleicher Varianz aussehen würde. Bis auf die angesprochene Diskretheit lassen sich keine nennenswerten Unterschiede erkennen.

Der Betrag der Autokorrelationsfunktion $C(l)$ in Systemen mit verallgemeinerter binärer Unordnung ist in Abb. 6.4 dargestellt. Es ist zu erkennen, daß die Autokorrelationen der Zuwächse $\Delta_i = \log \pi_{i+1} - \log \pi_i$ zwar von größerer Reichweite l als im Sinai-Fall sind, aber dennoch innerhalb weniger Schritte zerfallen.

Die letzte Größe, die im vorherigen Abschnitt für die Sinai-Unordnung betrachtet wurde, ist die Leistungsspektraldichte $\hat{x}(\omega)$. Das an dieser Stelle interessante Langzeitverhalten spiegelt sich in $\hat{x}(\omega)$ für kleine ω wieder. Dort zeigt die Leistungsspektraldichte keine nennenswerte Abweichung vom Sinai-Fall und kann sehr gut durch eine Cosinus-Funktion approximiert werden (Abb. 6.2).

Abschließend läßt sich damit festhalten, daß die zur Charakterisierung der statistischen Eigenschaften der stationären Dichte $\langle \pi \mid$ bzw. deren Logarithmus $\langle \log \pi \mid$ betrachteten

Größen allesamt unterstreichen, daß der das asymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ beschreibende Exponent β auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung bei $L \rightarrow \infty$ den Wert $\beta = \frac{1}{2}$ annimmt. Für den in Abschnitt 5.3 beobachteten Knick in der L -Abhängigkeit des Mittels $-\overline{\log \gamma(L)}$ liefern sie jedoch keinen Anhaltspunkt. Der Knick muß natürlich dennoch durch die Eigenschaften der stationären Dichte zu begründen sein, da nur sie in die Störungsrechnung 1.Ordnung (5.26) zur Bestimmung des Mittels $-\overline{\log \gamma(L)}$ eingeht. Die Zustandsdichte Z_L als Funktion der stationären Dichte, Gleichungen (2.23) und (5.23), reagiert folglich viel empfindlicher auf Abweichungen von der Normalverteilung als die in diesem Abschnitt untersuchten Größen.

7 Entropieproduktion

Ein wesentlicher Unterschied zwischen Sinai-Unordnung und verallgemeinerter binärer Unordnung mit Übergängen zu übernächsten Nachbarn ist, daß der stationäre Zustand im allgemeinen nicht durch detaillierte Balance gekennzeichnet ist. In diesem Kapitel soll dies genauer untersucht werden, indem zwei Größen vorgestellt werden, die geeignet sind, die Verletzung von detaillierter Balance zu charakterisieren und zu quantifizieren.

7.1 Herleitung

7.1.1 Lebowitz-Spohn-Wirkungsfunktional

Gegeben sei eine stationäre, irreduzible Markov-Kette mit endlichem Zustandsraum. Wie in den vorangegangenen Abschnitten werde dieser Zustandsraum mit \mathcal{S} und die Übergangswahrscheinlichkeiten für Übergänge von $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ mit $p_{i,j}$ bezeichnet. Dabei folge allerdings aus $p_{i,j} > 0$ nun immer auch $p_{j,i} > 0$. Eine Trajektorie der Länge $n + 1$ auf \mathcal{S} werde mit $\{\sigma\} = \{\sigma_0, \dots, \sigma_n\}$ bezeichnet,¹ die stationäre Dichte wie bisher mit $\langle \pi |$. Ferner sei

$$\mathcal{P}_{[0,n]} = \pi_{\sigma_0} p_{\sigma_0, \sigma_1} \cdots p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n} \quad (7.1)$$

$$\mathcal{P}_{[0,n]}^R = \pi_{\sigma_n} p_{\sigma_n, \sigma_{n-1}} \cdots p_{\sigma_1, \sigma_0} \quad (7.2)$$

$\mathcal{P}_{[0,n]}$ steht damit für die Wahrscheinlichkeit, den Pfad $\{\sigma\}$ im Fall der stationären Verteilung $\langle \pi |$ auf \mathcal{S} zu durchlaufen, während $\mathcal{P}_{[0,n]}^R$ die Wahrscheinlichkeit des Rückweges, d.h., $\{\sigma\}$ in umgekehrter Reihenfolge zu durchlaufen, angibt. Lebowitz und Spohn definieren damit in [70] die Funktion

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \left\langle e^{-\lambda W(n)} \right\rangle \quad (7.3)$$

mit

$$W(n, \{\sigma_0, \dots, \sigma_n\}) = - \log \frac{\mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\mathcal{P}_{[0,n]}} \quad (7.4)$$

Die Mittelung $\langle \cdot \rangle$ in Gleichung (7.3) ist dabei über alle möglichen Trajektorien $\{\sigma_0, \dots, \sigma_n\}$ durchzuführen. Der Ausdruck $W(n, \{\sigma\})$ kann als Größe, die die Verletzung von detaillierter Balance im stationären Zustand mißt [71],² und $e(\lambda)$ als deren momentenerzeugende Funktion aufgefaßt werden [72]. In Ermangelung eines besseren Namens wählen Lebowitz und Spohn [70] für alle Größen der Art $e(\lambda)$ oder $W(n, \{\sigma\})$ die Bezeichnung Wirkungsfunktional. Durch Einsetzen von Gleichung (7.4) in Gleichung (7.3) folgt eine weitere Interpretation für $e(\lambda)$

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{\{\sigma\}} \left[\frac{\mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\mathcal{P}_{[0,n]}} \right]^\lambda \mathcal{P}_{[0,n]} \quad (7.5)$$

¹Der Ausdruck $\sigma_i \in \mathcal{S}$ ist also der Zustand von \mathcal{S} bzw. der Gitterpunkt, den die Trajektorie zum Zeitpunkt i besetzt.

²Bei detaillierter Balance ist $\mathcal{P}_{[0,n]} = \mathcal{P}_{[0,n]}^R$ und damit $W(n, \{\sigma\}) = 0$.

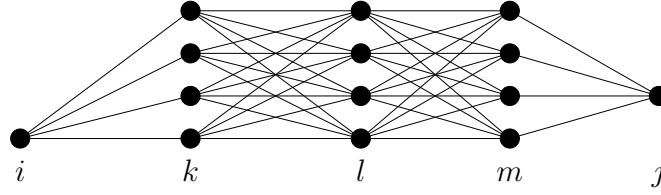


Abbildung 7.1: Sei $\sigma_0 = i \in \mathcal{S}$ und $\sigma_n = j \in \mathcal{S}$ mit $n = 4$ Schritten. Das Gewicht über den Pfad zwischen zwei Gitterpunkten $k \in \mathcal{S}$ und $l \in \mathcal{S}$ sei $A_{k,l}$. Dann ist die Summe über die Gewichte aller möglichen Pfade in $n = 4$ Schritten von $i \in \mathcal{S}$ nach $j \in \mathcal{S}$ der Ausdruck $(A^n)_{i,j} = \sum_{k,l,m} A_{i,k} A_{k,l} A_{l,m} A_{m,i}$.

Die Summe ist der Erwartungswert für das Verhältnis der Wahrscheinlichkeiten von Hin- und Rückweg in der Potenz λ .

Für die Verwendung von $e(\lambda)$ als Maß für die Verletzung von detaillierter Balance im stationären Zustand sind folgende Eigenschaften von $e(\lambda)$ von zentraler Bedeutung:

1. Das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ ist symmetrisch um $\lambda = 0.5$, d.h. $e(\lambda) = e(1 - \lambda)$. Dies ist bei Umformung der rechten Seite von Gleichung (7.5) zu sehen, wobei mit $\{\sigma^R\}$ eine Trajektorie in umgekehrter Richtung bezeichnet wird:

$$\begin{aligned} e(\lambda) &= - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{\{\sigma\}} \left[\frac{\mathcal{P}_{[0,n]}}{\mathcal{P}_{[0,n]}^R} \right]^{(1-\lambda)} \mathcal{P}_{[0,n]}^R \\ &= - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{\{\sigma^R\}} \left[\frac{\mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\mathcal{P}_{[0,n]}} \right]^{(1-\lambda)} \mathcal{P}_{[0,n]} = e(1 - \lambda) \end{aligned} \quad (7.6)$$

Das letzte Gleichheitszeichen folgt daraus, daß mit $\sum_{\{\sigma^R\}}$ die gleichen Trajektorien wie mit $\sum_{\{\sigma\}}$ erfaßt werden, da zu jeder Trajektorie $\{\sigma\}$ auch ihre Umkehrung $\{\sigma^R\}$ existiert.

2. Im Falle detaillierter Balance ist $e(\lambda) = 0$ für beliebige λ . Dies folgt aus Gleichung (7.5) mit $\mathcal{P}_{[0,n]} = \mathcal{P}_{[0,n]}^R$ und der Normierung $\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{P}_{[0,n]} = 1$. Ferner gilt $e(0) = e(1) = 0$, wie sofort Gleichung (7.5) zu entnehmen ist.
3. $e(\lambda)$ ist konkav [70].

Für die weitere Auswertung von Gleichung (7.5) werden zunächst die Wahrscheinlichkeiten p_{σ_i, σ_j} umsortiert

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{\{\sigma\}} \pi_{\sigma_0} \left[p_{\sigma_0, \sigma_1} \left(\frac{p_{\sigma_1, \sigma_0}}{p_{\sigma_0, \sigma_1}} \right)^\lambda \right] \cdots \left[p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n} \left(\frac{p_{\sigma_n, \sigma_{n-1}}}{p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n}} \right)^\lambda \right] \quad (7.7)$$

Die Summation über alle möglichen Trajektorien $\{\sigma\}$ der Länge $n + 1$ kann durch $n + 1$ Summen über die Gitterpunkte ersetzt werden. Und zwar folgt, wie Abb. 7.1 illustriert,

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{i, k \in \mathcal{S}} \pi_i \sum_{j_1 \in \mathcal{S}} \cdots \sum_{j_{n-1} \in \mathcal{S}} p_{i, j_1} \left(\frac{p_{j_1, i}}{p_{i, j_1}} \right)^\lambda \cdots p_{j_{n-1}, k} \left(\frac{p_{k, j_{n-1}}}{p_{j_{n-1}, k}} \right)^\lambda \quad (7.8)$$

wenn mit $\sigma_0 = i \in \mathcal{S}$ der Anfangspunkt, mit $\sigma_n = k \in \mathcal{S}$ der Endpunkt und mit $j_l = \sigma_l$ die Zwischenpunkte einer Trajektorie $\{\sigma\}$ identifiziert werden. Der unterstrichene Ausdruck

ist das (i, k) -Element der n -ten Potenz der Matrix

$$(\mathbf{B}(\lambda))_{i,j} = \begin{cases} p_{i,j} \left(\frac{p_{j,i}}{p_{i,j}} \right)^\lambda & p_{i,j} > 0 \\ 0 & p_{i,j} = 0 \end{cases} \quad (7.9)$$

Die Matrix \mathbf{B} geht damit aus der Übergangsmatrix \mathbf{P} hervor, indem jeder Eintrag $p_{i,j}$ von \mathbf{P} noch mit $\left(\frac{p_{j,i}}{p_{i,j}} \right)^\lambda$ gewichtet wird. Gleichung (7.8) wird folglich zu

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{i,k \in \mathcal{S}} \pi_i (\mathbf{B}^n(\lambda))_{i,k} \quad (7.10)$$

wobei die i - und k -Summation auch als Skalarprodukt

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \langle \pi | \mathbf{B}(\lambda)^n | \eta \rangle \quad (7.11)$$

mit $|\eta\rangle = \sum_i |i\rangle$ geschrieben werden kann. Der Ausdruck (7.11) kann mit Hilfe der Spektralzerlegung der Matrix \mathbf{B} weiter vereinfacht werden. Seien dazu mit $\{|b_i\rangle\}$ bzw. $\{\langle b_i|\}$ die Rechts- bzw. Linkseigenvektoren von \mathbf{B} zu den zugehörigen Eigenwerten $\{b_i\}$ gegeben. Die Erweiterung des Skalarprodukts $\langle \pi | \mathbf{B}(\lambda)^n | \eta \rangle$ in Gleichung (7.11) mit dem maximalen Eigenwert b_{max} von \mathbf{B} ergibt

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left(\log \left[\sum_{i \in \mathcal{S}} \langle \pi | b_i \rangle \left(\frac{b_i}{b_{max}} \right)^n \langle b_i | \eta \rangle \right] + \log(b_{max}^n) \right) \quad (7.12)$$

Bei Ausführung des Grenzwertes ($n \rightarrow \infty$) verschwinden in der Summe über $i \in \mathcal{S}$ alle Beiträge mit $b_i \neq b_{max}$. Folglich braucht nur das Glied mit $b_i = b_{max}$ berücksichtigt werden, womit Gleichung (7.12) durch

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \log \langle \pi | b_{max} \rangle \langle b_{max} | \eta \rangle + \log b_{max} \right) \quad (7.13)$$

ersetzt werden kann. Die Größe $\langle \pi | b_{max} \rangle \langle b_{max} | \eta \rangle$ ist endlich und unabhängig von n . Der erste Summand verschwindet also, und man erhält schließlich

$$e(\lambda) = - \log b_{max}(\lambda) \quad (7.14)$$

Das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ ist demnach durch den negativen Logarithmus des spektralen Radius $b_{max}(\lambda) = \rho(\mathbf{B}(\lambda))$ von \mathbf{B} gegeben. Gleichung (7.14) stellt überdies einen guten Ausgangspunkt für die numerische Bestimmung von $e(\lambda)$ dar.

7.1.2 Entropieproduktion

Von besonderer physikalischer Bedeutung ist die Ableitung von $e(\lambda)$ an der Stelle $\lambda = 0$, wie im folgenden zu sehen ist (vgl. [72, 73]). Den beschriebenen Eigenschaften von $e(\lambda)$ in Abschnitt 7.1.1 ist zunächst ohne Rechnung $\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \geq 0$ zu entnehmen.³ Differenzieren

³Dies ist analog zu dem Ergebnis der nichtnegativen Phasenkontraktion [70].

von Gleichung (7.5) selbst liefert

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \frac{\sum_{\{\sigma\}} \log \left(\frac{\pi_{\sigma_0} \mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\pi_{\sigma_n} \mathcal{P}_{[0,n]}} \right) \mathcal{P}_{[0,n]} \left(\frac{\pi_{\sigma_0} \mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\pi_{\sigma_n} \mathcal{P}_{[0,n]}} \right)^\lambda}{\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{P}_{[0,n]} \left(\frac{\pi_{\sigma_0} \mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\pi_{\sigma_n} \mathcal{P}_{[0,n]}} \right)^\lambda} \Big|_{\lambda=0} \quad (7.15)$$

$$= - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\{\sigma\}} \log \left(\frac{\pi_{\sigma_0} \mathcal{P}_{[0,n]}^R}{\pi_{\sigma_n} \mathcal{P}_{[0,n]}} \right) \mathcal{P}_{[0,n]} \quad (7.16)$$

was mit den Definitionen (7.1) und (7.2) für $\mathcal{P}_{[0,n]}$ und $\mathcal{P}_{[0,n]}^R$ als

$$\begin{aligned} \left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\{\sigma\}} \log \left[\frac{\pi_{\sigma_0} p_{\sigma_0, \sigma_1} \cdot \pi_{\sigma_1} p_{\sigma_1, \sigma_2} \cdots \pi_{\sigma_{n-1}} p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n}}{\pi_{\sigma_n} p_{\sigma_n, \sigma_{n-1}} \cdot \pi_{\sigma_{n-1}} p_{\sigma_{n-1}, \sigma_{n-2}} \cdots \pi_{\sigma_1} p_{\sigma_1, \sigma_0}} \cdot \frac{\pi_{\sigma_n}}{\pi_{\sigma_0}} \right] \mathcal{P}_{[0,n]} \\ &= e_p + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{P}_{[0,n]} \log \left[\frac{\pi_{\sigma_n}}{\pi_{\sigma_0}} \right] \end{aligned} \quad (7.17)$$

mit

$$e_p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\{\sigma\}} \left[\log \left(\frac{\pi_{\sigma_0} p_{\sigma_0, \sigma_1}}{\pi_{\sigma_1} p_{\sigma_1, \sigma_0}} \right) + \dots + \log \left(\frac{\pi_{\sigma_{n-1}} p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n}}{\pi_{\sigma_n} p_{\sigma_n, \sigma_{n-1}}} \right) \right] \mathcal{P}_{[0,n]} \quad (7.18)$$

geschrieben werden kann. Zunächst soll Gleichung (7.18) erneut mit der Definition (7.1) für $\mathcal{P}_{[0,n]}$ vereinfacht werden

$$e_p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\{\sigma\}} \left[\sum_{k=0}^{n-1} \log \left(\frac{\pi_{\sigma_k} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}}}{\pi_{\sigma_{k+1}} p_{\sigma_{k+1}, \sigma_k}} \right) \right] \pi_{\sigma_0} \prod_{i=1}^{n-1} p_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \quad (7.19)$$

Abspalten der Zwischenpunkte $\{\sigma_k, \sigma_{k+1}\}$ von $\{\sigma\}$ führt auf

$$e_p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{\sigma_k, \sigma_{k+1}} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}} \left[\log \left(\frac{\pi_{\sigma_k} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}}}{\pi_{\sigma_{k+1}} p_{\sigma_{k+1}, \sigma_k}} \right) \right] \sum_{\{\sigma\} \setminus \{\sigma_k, \sigma_{k+1}\}} \pi_{\sigma_0} \prod_{i \neq k} p_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \quad (7.20)$$

Die Wahrscheinlichkeiten $\mathcal{P}_{[0,n]}$ sind normiert, d.h. $\sum_{\{\sigma\}} \mathcal{P}_{[0,n]} = 1$. Berücksichtigt man dies, ergibt sich

$$\begin{aligned} &\sum_{\{\sigma\} \setminus \{\sigma_k, \sigma_{k+1}\}} \pi_{\sigma_0} \prod_{i \neq k} p_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \\ &= \sum_{\{\sigma_0, \dots, \sigma_{k-1}\}} \pi_{\sigma_0} \prod_{i=0}^{k-1} p_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \cdot \sum_{\{\sigma_{k+2}, \dots, \sigma_n\}} \prod_{i=k+1}^n p_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = \pi_{\sigma_k} \cdot 1 \end{aligned} \quad (7.21)$$

da der letzte Faktor lediglich die Wahrscheinlichkeit wiedergibt, von σ_{k+1} irgendwohin zu gehen, wohingegen der erste Faktor die Wahrscheinlichkeit bezeichnet, bei σ_k nach k Schritten zu sein, wenn das System im stationären Zustand präpariert wurde. Es verbleibt

$$e_p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{\sigma_k, \sigma_{k+1}} \pi_{\sigma_k} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}} \left[\log \left(\frac{\pi_{\sigma_k} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}}}{\pi_{\sigma_{k+1}} p_{\sigma_{k+1}, \sigma_k}} \right) \right] \quad (7.22)$$

7 Entropieproduktion

σ_k und σ_{k+1} können beliebige Gitterpunkte $i_k, i_{k+1} \in \mathcal{S}$ sein. Damit erhält man

$$e_p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \sum_{i_k, i_{k+1} \in \mathcal{S}} \pi_{i_k} p_{i_k, i_{k+1}} \log \left[\frac{\pi_{i_k} p_{i_k, i_{k+1}}}{\pi_{i_{k+1}} p_{i_{k+1}, i_k}} \right] = \sum_{i, j \in \mathcal{S}} \pi_i p_{i, j} \log \left[\frac{\pi_i p_{i, j}}{\pi_j p_{j, i}} \right] \quad (7.23)$$

Mit diesem Ergebnis wird die Berechnung von Gleichung (7.17) weitergeführt, wo $\mathcal{P}_{[0, n]}$ durch Gleichung (7.1) ersetzt und die Randpunkte $\{\sigma_0, \sigma_n\}$ von $\{\sigma\}$ abgespaltet werden

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = e_p + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{\{\sigma_0, \sigma_n\}} \log \left[\frac{\pi_{\sigma_n}}{\pi_{\sigma_0}} \right] \pi_{\sigma_0} \underbrace{\sum_{\{\sigma\} \setminus \{\sigma_0, \sigma_n\}} \prod_{k=0}^{n-1} p_{\sigma_k, \sigma_{k+1}}}_{\text{endlich für } |\mathcal{S}| < \infty} \quad (7.24)$$

Das Produkt in dem unterstrichenen Ausdruck ist die (Übergangs-)Wahrscheinlichkeit eines speziellen Pfades von σ_0 nach σ_n , die Summe über alle möglichen Pfade dieser Art ist somit eins. Für hinreichend große n können Anfangs- und Endpunkt einer Trajektorie unabhängig voneinander beliebige Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ auf der endlichen Kette \mathcal{S} annehmen. Damit folgt

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = e_p + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \underbrace{\sum_{\sigma_0 \in \mathcal{S}} \sum_{\sigma_n \in \mathcal{S}} \pi_{\sigma_n} \log \left[\frac{\pi_{\sigma_n}}{\pi_{\sigma_0}} \right]}_{\text{endlich für } |\mathcal{S}| < \infty} = e_p \quad (7.25)$$

wobei $|\mathcal{S}|$ die Anzahl der Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ (bzw. Mächtigkeit von \mathcal{S}) bezeichnet. Gleichung (7.23) läßt sich schließlich noch auf

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = e_p = \frac{1}{2} \sum_{i, j \in \mathcal{S}} (\pi_i p_{i, j} - \pi_j p_{j, i}) \log \left[\frac{\pi_i p_{i, j}}{\pi_j p_{j, i}} \right] \quad (7.26)$$

umschreiben.

Die Darstellung (7.26) der Ableitung von $e(\lambda)$ an der Stelle $\lambda = 0$ ist die von Schnakenberg [74] für chemische Reaktionen eingeführte Entropieproduktionsrate. Der Ausdruck folgt aus der Gibbs-Entropie für einen Markov-Prozeß

$$\mathcal{S}_G(\langle \pi(t) |) = - \sum_{i \in \mathcal{S}} \pi_i(t) \log \pi_i(t) \quad (7.27)$$

wobei die Zeitentwicklung der Dichte $\langle \pi(t) |$ auf \mathcal{S} durch die Mastergleichung

$$\frac{d\pi_i(t)}{dt} = \sum_{j \in \mathcal{S}} (\pi_j(t) p_{j, i} - \pi_i(t) p_{i, j}) \quad (7.28)$$

gegeben sei. Damit lautet die Zeitableitung der Gibbs-Entropie \mathcal{S}_G

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{S}_G}{dt} &= - \sum_{i \in \mathcal{S}} \left(\frac{d\pi_i(t)}{dt} \log \pi_i(t) + \frac{d\pi_i(t)}{dt} \right) \\ &= - \sum_{i, j \in \mathcal{S}} (\pi_j(t) p_{j, i} - \pi_i(t) p_{i, j}) \log \pi_i(t) - \sum_{i, j \in \mathcal{S}} (\pi_j(t) p_{j, i} - \pi_i(t) p_{i, j}) \end{aligned} \quad (7.29)$$

Der zweite Term in Gleichung (7.29) verschwindet, und es bleibt

$$\frac{dS_G}{dt} = \sum_{i,j \in \mathcal{S}} \pi_j(t) p_{j,i} \log \left[\frac{\pi_j(t)}{\pi_i(t)} \right] \quad (7.30)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \mathcal{S}} (\pi_i(t) p_{i,j} - \pi_j(t) p_{j,i}) \log \left[\frac{\pi_i(t)}{\pi_j(t)} \right] \quad (7.31)$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \mathcal{S}} (\pi_i(t) p_{i,j} - \pi_j(t) p_{j,i}) \log \left[\frac{\pi_i(t) p_{i,j}}{\pi_j(t) p_{j,i}} \right]}_{e_p(t)} - e_f(t) \quad (7.32)$$

mit

$$e_f(t) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\pi_i(t) p_{i,j} - \pi_j(t) p_{j,i}) \log \left[\frac{p_{i,j}}{p_{j,i}} \right] \quad (7.33)$$

Der Darstellung von $e_p(t)$ ist unmittelbar zu entnehmen, daß $e_p(t) \geq 0$ gilt, während das Vorzeichen von $e_f(t)$ unbestimmt ist. Nicolis und Mitarbeiter [75] nennen $e_p(t)$ die Entropieproduktion der Fluktuationen und konnten zeigen, daß im linearen Fall der stationäre Zustand durch das Minimum von $e_p(t)$ gekennzeichnet ist (*Minimum energy production theorem*). $e_f(t) = e_p(t) - \frac{dS_G}{dt}$ wird hingegen mit einem Entropiefluß identifiziert, der durch die Randbedingungen hervorgerufen wird, was in realen Systemen als Kopplung an externe Kräfte interpretiert werden kann [70, 71]. Im stationären Zustand, d.h., $\pi_i(t)$ ist durch π_i in Gleichung (7.32) zu ersetzen, ändert sich die Gibbs-Entropie S_G nicht, womit in diesem Fall der Entropiefluß e_f die Entropieproduktion e_p ausgleicht.

Zur Berechnung empfiehlt es sich wieder, $e_p = \frac{de(\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=0}$, Gleichung (7.26), durch die Eigenschaften einer Matrix auszudrücken. Mit Gleichung (7.14) kann hierfür

$$e_p = -\frac{\frac{d}{d\lambda} \rho(\mathbf{B}(\lambda))|_{\lambda=0}}{\rho(\mathbf{B}(\lambda=0))} \quad (7.34)$$

geschrieben werden. Für die weitere Auswertung wird das Hellman-Feynman-Theorem benötigt, das besagt, daß für einen Operator \mathbf{H} mit dem Eigenwert E und den zugehörigen Eigenzuständen $\langle \psi |$ und $| \psi \rangle$

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \langle \psi | \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \lambda} | \psi \rangle \quad (7.35)$$

gilt. Dies folgt aus

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} | H | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi \rangle + \langle \psi | H | \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \rangle \quad (7.36)$$

$$= E \langle \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi \rangle + E \langle \psi | \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \rangle = E \underbrace{\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \psi | \psi \rangle}_{=0} + \langle \psi | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi \rangle \quad (7.37)$$

Auf Gleichung (7.34) läßt sich dies anwenden, indem der spektrale Radius $\rho(\mathbf{B})$ durch das Skalarprodukt $\langle b_{max} | \mathbf{B} | b_{max} \rangle$ ausgedrückt wird. Zu beachten ist dabei, daß für $\lambda = 0$ die Matrix \mathbf{B} zur normalen Übergangsmatrix \mathbf{P} wird, womit bei entsprechender Normierung der Linkseigenvektor $\langle b_{max} |$ zum maximalen Eigenwert von $\mathbf{B}(\lambda = 0)$ durch die stationäre Dichte $\langle \pi |$ gegeben ist, während der entsprechende Rechtseigenvektor $| \eta \rangle$ alle Einträge

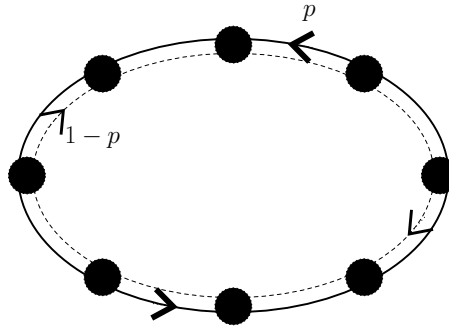


Abbildung 7.2: Homogener Ring mit den Übergangswahrscheinlichkeiten p für einen Sprung im Uhrzeigersinn und $1 - p$ für einen Sprung in entgegengesetzter Richtung an jedem Gitterpunkt $i \in \mathcal{S}$.

identisch eins aufweist. Damit ergibt sich

$$e_p = - \frac{\langle \pi | \frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}(\lambda = 0) | \eta \rangle}{\langle \pi | \mathbf{B}(\lambda = 0) | \eta \rangle} \quad (7.38)$$

Wegen $\mathbf{B}(\lambda = 0) = \mathbf{P}$, der Stationarität $\langle \pi | \mathbf{P} = \langle \pi |$ und der Normierung der stationären Dichte $\langle \pi | \eta \rangle = 1$ ist der Nenner eins. Das Ergebnis lautet

$$e_p = - \langle \pi | \frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}(\lambda = 0) | \eta \rangle \quad (7.39)$$

wobei die Komponenten der Matrix $\frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}|_{\lambda=0}$ durch

$$\left(\frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}(\lambda = 0) \right)_{i,j} = \begin{cases} p_{i,j} \log \left(\frac{p_{j,i}}{p_{i,j}} \right) & p_{i,j} > 0 \\ 0 & p_{i,j} = 0 \end{cases} \quad (7.40)$$

gegeben sind.

7.2 Beispiele

Das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ und die Entropiezuwachsrates e_p sollen zunächst anhand zweier Beispiele betrachtet werden, für die beide Größen analytisch bestimmt werden können.

7.2.1 Einfachring

Gegeben sei einen Ring \mathcal{S} der Länge L mit den Gitterpunkten $i = 1, \dots, L$. Die Wahrscheinlichkeit für einen Sprung um eine Stelle im Uhrzeigersinn sei p , für einen Sprung in entgegengesetzter Richtung $1 - p$. Alle Punkte sind damit äquivalent, so daß sich im stationären Fall Gleichverteilung einstellt, d.h. $\pi_i = \frac{1}{L}$ für alle $i \in \mathcal{S}$. Abb. 7.2 illustriert das Modell.

Zunächst soll das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ in der Darstellung (7.7) berechnet werden:

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{\{\sigma\}} \frac{p_{\sigma_1, \sigma_0}^\lambda}{p_{\sigma_0, \sigma_1}^{\lambda-1}} \dots \frac{p_{\sigma_n, \sigma_{n-1}}^\lambda}{p_{\sigma_{n-1}, \sigma_n}^{\lambda-1}} \frac{1}{L} \quad (7.41)$$

Für eine Trajektorie $\{\sigma\}$ der Länge $n + 1$ mit Start an einem bestimmten Gitterpunkt

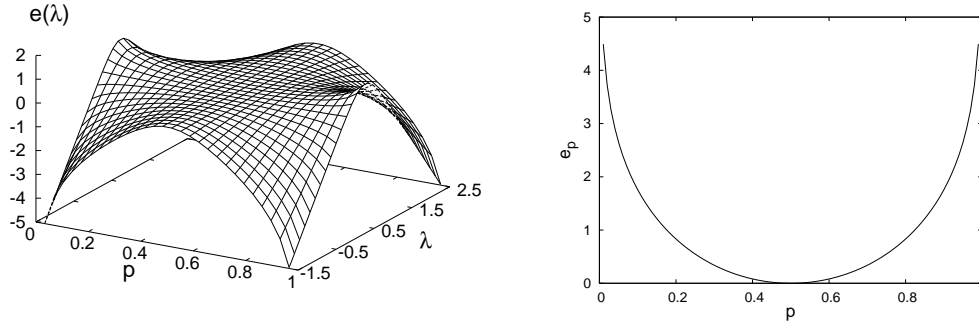


Abbildung 7.3: Links: Das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ ist eine symmetrische Funktion um $p = \frac{1}{2}$ und symmetrisch und konvex um $\lambda = \frac{1}{2}$. Rechts: Die Entropieproduktionsrate e_p ist symmetrisch, konvex nach oben und wird minimal, d.h. null, für den symmetrischen Fall mit $p = \frac{1}{2}$.

$i \in \mathcal{S}$ gibt es für jeden der n Sprünge immer genau zwei Möglichkeiten, unabhängig davon, welche Gitterpunkte konkret besucht werden. Man hat folglich $\binom{n}{k}$ Möglichkeiten, einen Pfad mit Start bei $i \in \mathcal{S}$ zu konstruieren, der genau k Sprünge im Uhrzeigersinn umfaßt. Daraus folgt

$$e(\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \left[\frac{p^\lambda}{(1-p)^{\lambda-1}} \right]^k \left[\frac{(1-p)^\lambda}{p^{\lambda-1}} \right]^{n-k} \quad (7.42)$$

Die stationäre Dichte $\pi_i = \frac{1}{L}$ in Gleichung (7.41) kürzt sich dabei durch die L äquivalenten Startpunkte $i \in \mathcal{S}$ heraus. Umschreiben der binomischen Formel und Ausführung des Grenzwertes ($n \rightarrow \infty$) liefert

$$e(\lambda) = - \log \left[p^\lambda (1-p)^{1-\lambda} + (1-p)^\lambda p^{1-\lambda} \right] \quad (7.43)$$

Für festes p ist die Symmetrie von $e(\lambda)$ um $\lambda = \frac{1}{2}$ ebenso offensichtlich wie die Symmetrie von $e(\lambda)$ um $p = \frac{1}{2}$ für festes λ . Überdies ist sofort zu erkennen, daß für detaillierte Balance bei $p = \frac{1}{2}$ das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ für beliebige λ null wird. Das Ergebnis ist in Abb. 7.3 (links) dargestellt.

Zur Berechnung der Entropieproduktionsrate e_p ist die Ableitung von Gleichung (7.43) an der Stelle $\lambda = 0$ zu bilden:

$$\left. \frac{de(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = - \left. \frac{\frac{d}{d\lambda} (p^\lambda (1-p)^{1-\lambda} + (1-p)^\lambda p^{1-\lambda})}{p^\lambda (1-p)^{1-\lambda} + (1-p)^\lambda p^{1-\lambda}} \right|_{\lambda=0} \quad (7.44)$$

$$= - \left. \frac{(p^\lambda (1-p)^{1-\lambda} - (1-p)^\lambda p^{1-\lambda}) (\log p - \log(1-p))}{p^\lambda (1-p)^{1-\lambda} + (1-p)^\lambda p^{1-\lambda}} \right|_{\lambda=0} \quad (7.45)$$

$$= (2p - 1) \log \left[\frac{p}{1-p} \right] \quad (7.46)$$

Die Entropiezuwachsrates e_p kann aber natürlich auch ohne Kenntnis des Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ leicht direkt aus Gleichung (7.26) berechnet werden:

$$e_p = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in \mathcal{S}} (\pi_i p_{i,j} - \pi_j p_{j,i}) \log \left[\frac{\pi_i p_{i,j}}{\pi_j p_{j,i}} \right] \quad (7.47)$$

$$= \sum_{i \in \mathcal{S}} (\pi_i p_{i,i-1} - \pi_{i-1} p_{i-1,i}) \log \left[\frac{\pi_i p_{i,i-1}}{\pi_{i-1} p_{i-1,i}} \right] \quad (7.48)$$

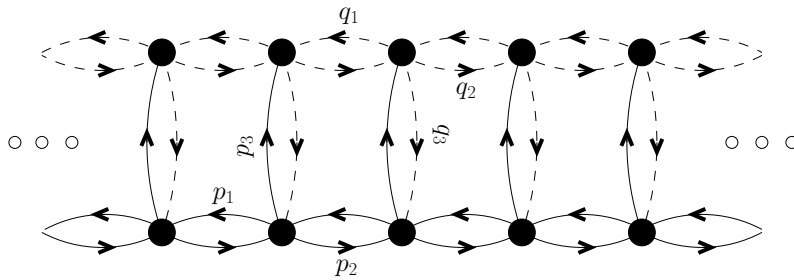


Abbildung 7.4: Doppelring. Die Übergangswahrscheinlichkeiten sind für alle äußeren (unteren) Gitterpunkte und alle inneren (oberen) Gitterpunkte gleich.

Mit $p_{i,i-1} = p$, $p_{i,i+1} = 1 - p$ und $\pi_i = \frac{1}{L}$ erhält man hieraus das Ergebnis (7.46):

$$e_p = \sum_{i=1}^L \left[\frac{1}{L} p - \frac{1}{L} (1 - p) \right] \log \left[\frac{p}{1 - p} \right] = (2p - 1) \log \left[\frac{p}{1 - p} \right] \quad (7.49)$$

Die graphische Darstellung der Entropiezuwachsrates e_p gibt Abb. 7.3 (rechts). Bei $p = \frac{1}{2}$ ist detaillierte Balance erfüllt; an dieser Stelle ist $e_p = 0$. Überdies ist e_p konvex, symmetrisch und wird maximal für $p \rightarrow 0$ bzw. $p \rightarrow 1$, was auch ohne Rechnung unmittelbar aus den Eigenschaften von $e(\lambda)$ als Funktion von p für konstantes λ abzuleiten ist.

7.2.2 Doppelring

Wie im vorangegangenen Abschnitt 7.2.2 werde wieder ein translationssymmetrischer Ring betrachtet, der aber nun aus zwei Ketten besteht. Jede der beiden Ketten habe die Länge $\frac{L}{2}$. Die Übergangswahrscheinlichkeiten in der inneren Kette (die obere Kette in Abb. 7.4) seien q_1 für einen Sprung im Uhrzeigersinn und q_2 für einen Sprung in entgegengesetzter Richtung. $q_3 \equiv 1 - q_1 - q_2$ sei die Wahrscheinlichkeit, in die äußere Kette zu wechseln. Analog lauten die Übergangswahrscheinlichkeiten in der äußeren Kette p_1 , p_2 und $p_3 \equiv 1 - p_1 - p_2$. Der Doppelring ist damit ein spezielles System oder Grenzfall des zur verallgemeinerten binären Unordnung gehörenden Übergangsgraphen aus Abb. 2.6, Abschnitt 2.2.1, mit periodischen Randbedingungen.

Erneut soll mit der Berechnung des Wirkungsfunktionals $e(\lambda)$ mit Gleichung (7.5) begonnen werden. Die Summe in dieser Gleichung ist über alle möglichen Pfade der Länge $n + 1$ zu bilden. Um die Pfade vollständig zu erfassen, wird zunächst der Vektor

$$|\mathcal{R}\rangle = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3)^T \quad (7.50)$$

definiert. ξ_1 bezeichne hierbei den Zustand, daß der Zufallswanderer in der inneren Kette im Uhrzeigersinn springt, ξ_2 kennzeichnet einen Sprung in der inneren Kette entgegen dem Uhrzeigersinn, und ξ_3 charakterisiert einen Sprung von der inneren in die äußere Kette. Die η_i seien analog definiert. Die erlaubten bzw. möglichen direkten Übergänge zwischen all diesen Zuständen ξ_i und η_i sind in Abb. 7.5 zusammengefaßt. Für eine Trajektorie $\{\sigma\}$, die an einem bestimmten Gitterpunkt des inneren Rings oder an dem im äußeren Ring benachbarten Gitterpunkt beginnt, gibt der Vektor $|\mathcal{R}\rangle$ alle Möglichkeiten für die Startsequenz $\{\sigma_0, \sigma_1\}$ an. Der nächste Zeitschritt ergibt sich gemäß Abb. 7.5 durch Anwendung

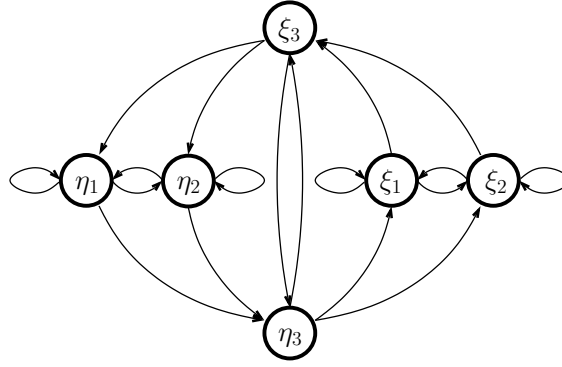


Abbildung 7.5: Mögliche Übergänge zwischen den Zuständen η_i und ξ_j für den Doppelring aus Abb. 7.4.

von $|\mathcal{R}\rangle$ auf die Übergangsmatrix \mathbf{M}

$$\mathbf{M} \equiv \begin{pmatrix} f_{\xi_1 \leftarrow \xi_1} & f_{\xi_1 \leftarrow \xi_2} & 0 & 0 & 0 & f_{\xi_1 \leftarrow \eta_3} \\ f_{\xi_2 \leftarrow \xi_1} & f_{\xi_2 \leftarrow \xi_2} & 0 & 0 & 0 & f_{\xi_2 \leftarrow \eta_3} \\ f_{\xi_3 \leftarrow \xi_1} & f_{\xi_3 \leftarrow \xi_2} & 0 & 0 & 0 & f_{\xi_3 \leftarrow \eta_3} \\ 0 & 0 & f_{\eta_1 \leftarrow \xi_3} & f_{\eta_1 \leftarrow \eta_1} & f_{\eta_1 \leftarrow \eta_2} & 0 \\ 0 & 0 & f_{\eta_2 \leftarrow \xi_3} & f_{\eta_2 \leftarrow \eta_1} & f_{\eta_2 \leftarrow \eta_2} & 0 \\ 0 & 0 & f_{\eta_3 \leftarrow \xi_3} & f_{\eta_3 \leftarrow \eta_1} & f_{\eta_3 \leftarrow \eta_2} & 0 \end{pmatrix} \quad (7.51)$$

wobei $f_{\xi_i \leftarrow \xi_j}$ das Gewicht des Übergangs vom Zustand ξ_j in den Zustand ξ_i bezeichnet. Eine Reihe von Übergängen ist nicht erlaubt, wodurch 18 der 36 Einträge von \mathbf{M} verschwinden. Die konkreten Gewichte sind Gleichung (7.5) unter Beachtung der entsprechend definierten Übergangswahrscheinlichkeiten p_i bzw. q_i zu entnehmen, so daß \mathbf{M} für $-\lambda$ die Form

$$\mathbf{M}(-\lambda) = \begin{pmatrix} q_1 \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^\lambda & q_2 \left(\frac{q_2}{q_1}\right)^\lambda & 0 & 0 & 0 & q_3 \left(\frac{q_3}{p_3}\right)^\lambda \\ q_1 \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^\lambda & q_2 \left(\frac{q_2}{q_1}\right)^\lambda & 0 & 0 & 0 & q_3 \left(\frac{q_3}{p_3}\right)^\lambda \\ q_1 \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^\lambda & q_2 \left(\frac{q_2}{q_1}\right)^\lambda & 0 & 0 & 0 & q_3 \left(\frac{q_3}{p_3}\right)^\lambda \\ 0 & 0 & p_3 \left(\frac{p_3}{q_3}\right)^\lambda & p_1 \left(\frac{p_1}{p_2}\right)^\lambda & p_2 \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^\lambda & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \left(\frac{p_3}{q_3}\right)^\lambda & p_1 \left(\frac{p_1}{p_2}\right)^\lambda & p_2 \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^\lambda & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \left(\frac{p_3}{q_3}\right)^\lambda & p_1 \left(\frac{p_1}{p_2}\right)^\lambda & p_2 \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^\lambda & 0 \end{pmatrix} \quad (7.52)$$

annimmt.

Um die Gewichte aller möglichen Pfade der Länge $n + 1$ mit Start auf einem der beiden fest gewählten Gitterpunkte zu erhalten, muß die Matrix \mathbf{M} n -mal auf $|\mathcal{R}\rangle$ angewendet werden. Das Ergebnis ist anschließend mit $\frac{L}{2}$ zu multiplizieren, da es so viele zu dem fest gewählten Paar von Startpunkten äquivalente Paare gibt. Bezeichnet man mit $P(\xi_i)$ die Wahrscheinlichkeit eines Zufallswanderers, im Zustand ξ_i zu sein, wenn das Gesamtsystem im stationären Zustand präpariert wurde, und mit $|P(\mathcal{R})\rangle = (P(\xi_1), P(\xi_2), P(\xi_3), P(\eta_1), P(\eta_2), P(\eta_3))^T$ den daraus gebildeten Vektor, so folgt für das Wirkungsfunktional

$$e(-\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \langle \eta | \mathbf{M}^n(-\lambda) | P(\mathcal{R}) \rangle \frac{L}{2} \quad (7.53)$$

Zur weiteren Berechnung von Gleichung (7.53) wird die Matrix \mathbf{M} diagonalisiert, d.h., es sei $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{U} = \mathbf{D}$ mit der Diagonalmatrix \mathbf{D} und der durch die entsprechenden Rechtseigenvektoren von \mathbf{M} gebildeten Matrix \mathbf{U} :

$$e(-\lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \langle \eta \mid \mathbf{U} \mathbf{D}^n \mathbf{U}^{-1} \mid P(\mathcal{R}) \rangle \quad (7.54)$$

Dies kann wie bei der allgemeinen Berechnung von $e(\lambda)$ als Matrixeigenwert, Gleichung (7.12), durch Ausklammern des maximalen Eigenwerts m_{max} von \mathbf{M} zu

$$\begin{aligned} e(-\lambda) &= - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \langle \eta \mid \mathbf{U} \left(\frac{\mathbf{D}}{m_{max}} \right)^n \mathbf{U}^{-1} \mid P(\mathcal{R}) \rangle - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log m_{max}^n \\ &= - \log m_{max} \end{aligned} \quad (7.55)$$

vereinfacht werden. Das Problem ist damit auf die Berechnung des maximalen Eigenwertes m_{max} von \mathbf{M} reduziert worden.

Für die Berechnung von m_{max} bietet es sich an, in \mathbf{M} , Gleichung (7.52), Spalte 3 mit Spalte 6 zu vertauschen, da sich dabei die Eigenwerte nicht ändern und in den Eigenvektoren lediglich die entsprechenden Einträge permutieren:

$$\tilde{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} \mathbf{X} & 0 \\ 0 & \mathbf{Y} \end{pmatrix} \quad (7.56)$$

Die 3×3 -Matrizen \mathbf{X} und \mathbf{Y} sind insbesondere dadurch gekennzeichnet, daß jeweils alle Spalten gleich sind. Das charakteristische Polynom lautet

$$0 \stackrel{!}{=} |\tilde{\mathbf{M}} - m\mathbf{I}_6| = |\mathbf{X} - m\mathbf{I}_3| \cdot |\mathbf{Y} - m\mathbf{I}_3| \quad (7.57)$$

wobei \mathbf{I}_k die $k \times k$ -Einheitsmatrix bezeichnet. Für die Eigenwerte von \mathbf{X} ergibt sich

$$0 = |\mathbf{X} - m\mathbf{I}_3| = \left[q_1 \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^\lambda - m \right] m^2 + q_2 \left(\frac{q_2}{q_1} \right)^\lambda m^2 + q_3 \left(\frac{q_3}{p_3} \right)^\lambda m^2 \quad (7.58)$$

und analog gilt für die Eigenwerte von \mathbf{Y}

$$0 = |\mathbf{Y} - m\mathbf{I}_3| = \left[p_1 \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^\lambda - m \right] m^2 + p_2 \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^\lambda m^2 + p_3 \left(\frac{p_3}{q_3} \right)^\lambda m^2 \quad (7.59)$$

Offenbar sind sowohl in Gleichung (7.58) als auch in Gleichung (7.59) jeweils zwei Eigenwerte null. Für die verbleibenden Eigenwerte gilt

$$m_1 = q_1 \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^\lambda + q_2 \left(\frac{q_2}{q_1} \right)^\lambda + q_3 \left(\frac{q_3}{p_3} \right)^\lambda \quad (7.60)$$

$$m_2 = p_1 \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^\lambda + p_2 \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^\lambda + p_3 \left(\frac{p_3}{q_3} \right)^\lambda \quad (7.61)$$

Detaillierte Balance ist bei $p_1 = p_2$, $q_1 = q_2$ und $q_3 = p_3$ erfüllt. Dies führt unmittelbar auf $m_1 = m_2 = 0$ und damit zu $e(\lambda) = 0$. Die Symmetriebedingung $e(-\lambda) = e(1 + \lambda)$ aus Abschnitt 7.1.1 ist ebenfalls der Lösung sofort zu entnehmen. Um sich den Einfluß des Verhältnisses der Übergangswahrscheinlichkeiten auf $e(\lambda)$ zu überlegen, sei $q_1 > q_2$ und $p_1 > p_2$. Mit steigendem Verhältnis von $\frac{q_1}{q_2}$ bzw. $\frac{p_1}{p_2}$ werden die Kreisströme im inneren bzw. äußeren Ring größer. Wie im vorangegangenen Abschnitt 7.2.2 ist mit stärkeren Kreisströmen ein Kleinerwerden von $e(\lambda)$ verbunden. Zusätzlich fällt $e(\lambda)$ auch mit stei-

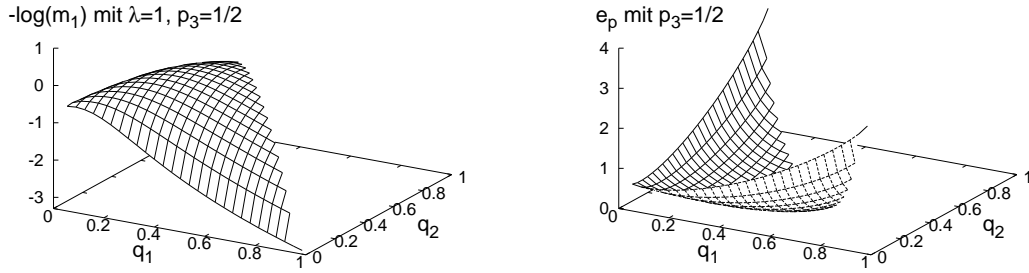


Abbildung 7.6: Unter der Annahme, daß m_1 der maximale Eigenwert von \mathbf{M} ist und $p_3 = \frac{1}{2}$ gilt, zeigt die linke Grafik das Wirkungsfunktional $e(\lambda = 1)$ und die rechte Grafik die Entropiezuwachsrates e_p .

genden Kreisströmen zwischen den Ringen, was durch q_3 und p_3 vermittelt wird. Das Ergebnis ist in Abb. 7.6 (links) dargestellt.

Es bleibt noch die Berechnung der Entropiezuwachsrates $e_p = -\frac{de(-\lambda)}{d\lambda}|_{\lambda=0}$. O. B. d. A. sei m_1 der maximale Eigenwert von \mathbf{M} . Einsetzen von Gleichung (7.60) ergibt

$$e_p = \frac{q_1 \log \left[\frac{q_1}{q_2} \right] \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^\lambda + q_2 \log \left[\frac{q_2}{q_1} \right] \left(\frac{q_2}{q_1} \right)^\lambda + q_3 \log \left[\frac{q_3}{p_3} \right] \left(\frac{q_3}{p_3} \right)^\lambda}{q_1 \left(\frac{q_1}{q_2} \right)^\lambda + q_2 \left(\frac{q_2}{q_1} \right)^\lambda + q_3 \left(\frac{q_3}{p_3} \right)^\lambda} \Big|_{\lambda=0} \quad (7.62)$$

$$= q_1 \log \left[\frac{q_1}{q_2} \right] + q_2 \log \left[\frac{q_2}{q_1} \right] + q_3 \log \left[\frac{q_3}{p_3} \right] \quad (7.63)$$

Für $p_3 = \frac{1}{2}$ zeigt die rechte Grafik von Abb. 7.6 das Ergebnis. Die Entropiezuwachsrates (7.46) des Einfachrings folgt aus $q_3 = 0$. q_1 nimmt dann die Rolle von p und q_2 die Rolle von $(1-p)$ in Gleichung (7.46) ein, und es ergibt sich aus Gleichung (7.63)

$$e_p = (p - (1-p)) \log \left[\frac{p}{1-p} \right] = (2p-1) \log \left[\frac{p}{1-p} \right] \quad (7.64)$$

Die Entropiezuwachsrates für den Einfachring ist also als Grenzfall in Gleichung (7.63) enthalten.

7.3 Verallgemeinerte binäre Unordnung

Im Falle der Sinai-Unordnung ist detaillierte Balance im stationären Zustand immer erfüllt, womit das Lebowitz-Spohn Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ und die Entropiezuwachsrates e_p null werden. Bei verallgemeinerter binärer Unordnung, die in diesem Abschnitt untersucht werden soll, gilt dies im allgemeinen nicht.

Die Parameterabhängigkeit der beiden Größen $e(\lambda)$ und e_p soll anhand der Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_1(\kappa) = \left\{ \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6} \right\} \quad (7.65)$$

studiert werden. In der linken Grafik von Abb. 7.7 ist das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ bei $\mathbf{p}_1(\frac{1}{12})$ dargestellt. Die bei den allgemeinen Eigenschaften von $e(\lambda)$ in Abschnitt 7.1.1 diskutierte Konvexität und Symmetrie um $\lambda = \frac{1}{2}$ sind deutlich zu sehen. Für $\lambda = 2$ ist in der mittleren Grafik von Abb. 7.7 das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ als Funktion der Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}_1(\kappa)$ gegeben. Das Wirkungsfunktional $e(\lambda = 2)$ besitzt ein

7 Entropieproduktion

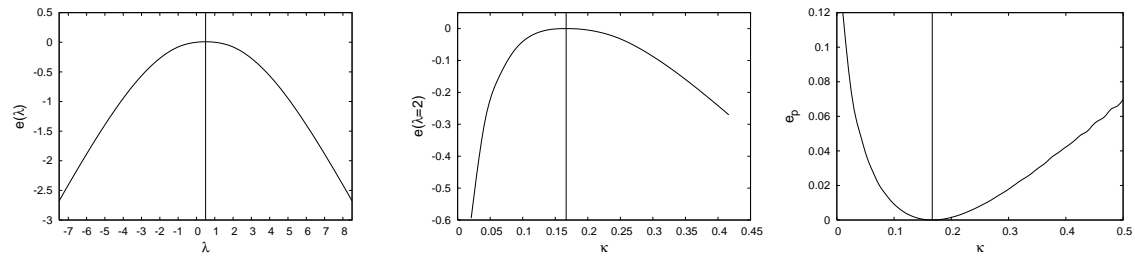


Abbildung 7.7: Links: Das Wirkungskunktional $e(\lambda)$ gemäß Gleichung (7.14) wurde für ein System mit $\mathbf{p}_1(\frac{1}{12})$ aus einer Realisierung von $\mathbf{B}(\lambda) \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 4000$ bestimmt. Wie in Abschnitt angegeben, ist $e(\lambda)$ konvex und symmetrisch um $\lambda = \frac{1}{2}$. Mitte: In der mittleren Grafik wurde für $L = 4000$ und $\lambda = 2$ der Parameter κ in (7.65) variiert und $e(\lambda)$ ebenfalls gemäß Gleichung (7.14) bestimmt. Bei $\kappa = \frac{1}{6}$ sind die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}_1(\kappa)$ symmetrisch, womit dort detaillierte Balance erfüllt ist und $e(\lambda) = 0$ gilt. Rechts: Die nach Gleichung (7.39) aus 250 Realisierungen von $\frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}(\lambda = 0) \in \mathbb{R}^{L \times L}$ mit $L = 2000$ bestimmte Entropiezunahme e_p zeigt als Funktion von κ ein zur mittleren Grafik spiegelbildliches Verhalten.

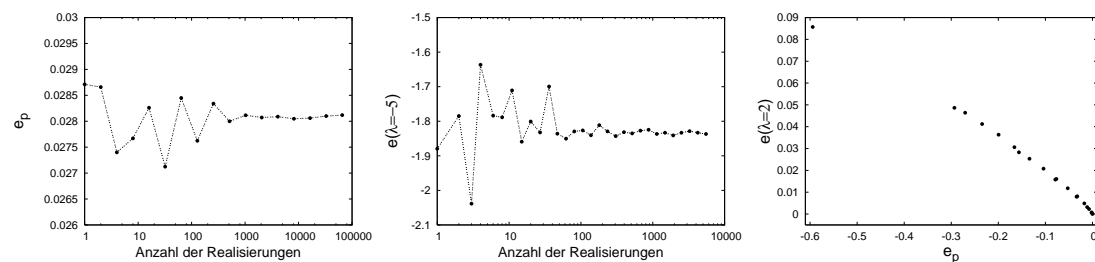


Abbildung 7.8: Links und Mitte: Die Entropiezunahme e_p und das Lebowitz-Spohn-Wirkungskunktional $e(\lambda)$ zeigen bei kleinen Systemgrößen L (links: $L = 1000$, Mitte: $L = 100$) ähnlich geringe relative Schwankungen für nur wenige Realisierungen von $\mathbf{B}(\lambda) \in \mathbb{R}^{L \times L}$. Rechts: Es besteht ein streng monotoner Zusammenhang zwischen e_p und $e(\lambda)$. Allen drei Grafiken liegt der Parametersatz $\mathbf{p}_1(\frac{1}{16})$ zugrunde.

Maximum bei $\mathbf{p}_1(\frac{1}{6})$, wo die Übergangswahrscheinlichkeiten (7.65) symmetrisch werden und folglich detaillierte Balance im stationären Zustand erfüllt ist. Mit zunehmender Entfernung hiervon fällt $e(\lambda = 2)$ streng monoton. Die in der rechten Grafik von Abb. 7.7 dargestellte Entropiezunahme e_p zeigt das gleiche Verhalten in Abhängigkeit von κ , allerdings mit geänderten Vorzeichen. Hier ist $\mathbf{p}_1(\frac{1}{6})$ ein Minimum.⁴ Daß zwischen der Entropiezunahme e_p und dem Wirkungskunktional $e(\lambda)$ ein streng monotoner Zusammenhang besteht, wird auch durch Abb. 7.8 (rechts) unterstrichen.

Eine zentrale Eigenschaft der beiden Größen $e(\lambda)$ und e_p bei verallgemeinerter binärer Unordnung ist ihre Selbstmittelung, wie den Abbildungen 7.8 und 7.9 zu entnehmen ist.

⁴Bei $\mathbf{p}_1(0)$ und $\mathbf{p}_1(\frac{1}{2})$ sind die Größen $e(\lambda)$ und e_p nicht definiert, da die Gleichung (7.3) die Existenz des Hin- und des Rückweges voraussetzen.

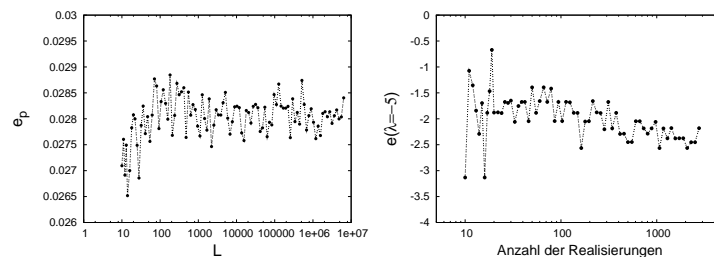


Abbildung 7.9: Weder die Entropiezunahme e_p (links) noch die das Lebowitz-Spohn-Wirkungskunktional $e(\lambda)$ (rechts) zeigen eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Systemgröße L .

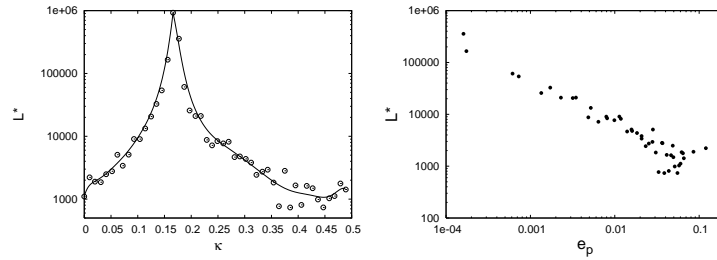


Abbildung 7.10: Links: Für die Übergangswahrscheinlichkeiten $\mathbf{p}_1(\kappa)$ ist die Systemgröße L^* dargestellt, bei der die Entweichrate bzw. $-\log \gamma(L)$ abrupt vom präasymptotischen zum asymptotischen Verhalten, vgl. Abb. 5.12, wechselt. Die Punkte dokumentieren dabei die Ergebnisse, durch die eine interpolierte Kurve (Bezier) gelegt wurde, da für $\kappa \rightarrow \frac{1}{2}$ die Größe L^* nicht mehr sicher bestimmt werden kann. Rechts: Die Größen L^* und e_p sind näherungsweise durch ein Potenzgesetz verknüpft.

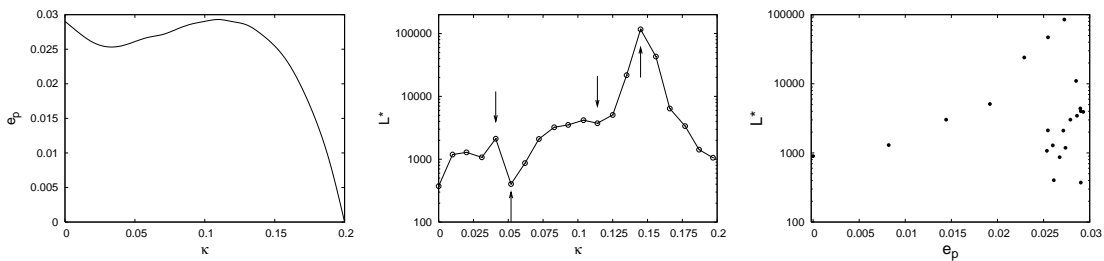


Abbildung 7.11: Links: Die Entropieproduktionsrate e_p zeigt für den Parametersatz $\mathbf{p}_2(\kappa)$ neben dem Minimum bei $\kappa = \frac{1}{5}$ zwei Extrema bei $\kappa \approx 0.035$ und $\kappa \approx 0.11$. Mitte: Die mit \downarrow gekennzeichneten Extremstellen in e_p sind im Verhalten der Größe $L^*(\kappa)$, bei der in Abschnitt die Entweichrate $\gamma(L)$ abrupt ihr Verhalten ändert, allenfalls ganz schwach wiederzufinden. Rechts: Es besteht kein funktionaler Zusammenhang zwischen L^* und e_p wie in Abb. 7.10 (rechts).

Mit steigender Zahl der Realisierungen der Matrizen $\mathbf{B}(\lambda) \in \mathbb{R}^{L \times L}$ und $\frac{d\mathbf{B}}{d\lambda}(\lambda = 0) \in \mathbb{R}^{L \times L}$ aus den Gleichungen (7.9) und (7.39) reduzieren sich ebenso wie bei zunehmender Dimension L die Schwankungen in den numerischen Ergebnissen von $e(\lambda)$ und e_p . Die Entropiezuwachsrates e_p kann dabei viel leichter für große L bestimmt werden, da in Gleichung (7.39) nur die stationäre Dichte als Unbekannte eingeht. Das Lebowitz-Spohn-Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ erfordert hingegen gemäß Gleichung (7.14) die spektrale Zerlegung einer $(L \times L)$ -Matrix, was mit erheblich höherem Aufwand verbunden ist.

In Abschnitt 5.3 wurde als wesentlicher Unterschied zwischen der Sinai-Unordnung und der verallgemeinerten binären Unordnung ein ausgedehnter präasymptotischer Bereich im Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ (bzw. von $-\log \gamma(L)$) beobachtet, der bei L^* , vgl. Abb. 5.12, abrupt in das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung überging. Als Ursache hierfür wurde das Fehlen von detaillierter Balance im stationären Zustand angenommen. In Abb. 7.10 (links) ist der Wert $L^*(\kappa)$ logarithmisch als Funktion von $\mathbf{p}_1(\kappa)$ aufgetragen und weist eine spiegelbildliche Monotonie zur Entropiezuwachsrates e_p und eine Singularität bei $\mathbf{p}_1(\kappa = \frac{1}{6})$ auf. Die rechte Grafik von Abb. 7.10 offenbart ein Potenzgesetz als Zusammenhang zwischen L^* und e_p . Dies ist jedoch die Folge der speziellen Wahl der Übergangswahrscheinlichkeiten (7.65), wie die Betrachtung des Parametersatzes

$$\mathbf{p}_2(\kappa) = \left\{ \frac{4}{10} - 2\kappa, \frac{7}{40} + \kappa, \frac{1}{10}, \frac{5}{40} + 2\kappa, \frac{2}{10} - \kappa \right\} \quad (7.66)$$

in Abb. 7.11 zeigt, der ein deutlich komplexeres Verhalten als $\mathbf{p}_1(\kappa)$ aufweist. Ausgezeichnete Punkte für $\mathbf{p}_2(\kappa)$ sind $\mathbf{p}_2(\frac{1}{20})$, $\mathbf{p}_2(\frac{1}{7})$ und $\mathbf{p}_2(\frac{1}{5})$. Bei $\mathbf{p}_2(\frac{1}{5})$ werden die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,i+2}$ und $p_{i,i-2}$ null für alle $i \in \mathcal{S}$ und das System geht in den binären

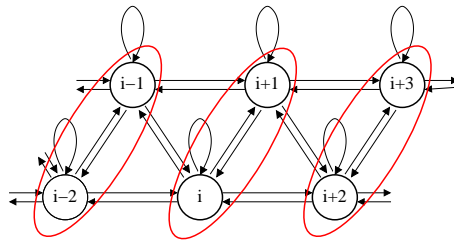


Abbildung 7.12: Bei der Vergrößerung (*coarse graining*) des Systems von Gleichung (7.66) mit $\kappa = \frac{1}{20}$ werden zwei Zustände zu einem neuen zusammengefaßt.

Fall der Sinai-Unordnung über. Folglich verschwinden dort die beiden Größen $e(\lambda)$ und e_p . In der Nähe von $\mathbf{p}_2(\frac{1}{7})$ gleichen sich hingegen die Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,i-1}$, $p_{i,i-2}$ und $p_{i,i+1}$, $p_{i,i+2}$ stark an, womit das System dem symmetrischen Fall sehr nahe kommt. Bei $\mathbf{p}_2(\frac{1}{20})$ gilt schließlich $p_{i,i-1} = p_{i,i+1}$, während das Verhältnis von $p_{i,i-2} = \frac{3}{10}$ zu $p_{i,i+2} = \frac{3}{20}$ mit 2 recht groß wird und somit das Verhalten dominiert. Faßt man, wie in Abb. 7.12 gezeigt, zwei Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ und $i+1 \in \mathcal{S}$ zu einem neuen $\hat{i} \in \hat{\mathcal{S}}$ zusammen,⁵ so gilt für $\hat{\mathcal{S}}$ Sinai-Unordnung.⁶ Das Verhalten sollte sich also bei $\mathbf{p}_2(\frac{1}{20})$ dem der Sinai-Unordnung annähern. Die Entropiezuwachsrates e_p in Abhängigkeit von $\mathbf{p}_2(\kappa)$ ist in Abb. 7.11 (links) dargestellt. Bei $\mathbf{p}_2(\kappa = \frac{1}{5})$ gilt $e_p = 0$, aber die beiden anderen Extremstellen im Verlauf der Entropieproduktionsrate treten nicht bei den soeben diskutierten Werten $\mathbf{p}_2(\frac{1}{7})$ und $\mathbf{p}_2(\frac{1}{20})$ auf, wo jedoch die Größe L^* in der Grafik rechts daneben Extrema besitzt (gekennzeichnet durch \uparrow). Die in der gleichen Grafik durch \downarrow angezeigten Extremstellen von e_p liegen hingegen etwas links davon. Wenn man, wie bei dem Parametersatz $\mathbf{p}_1(\kappa)$ zu sehen, annimmt, daß die Entropieproduktionsrate $e_p(\kappa)$ und $L^*(\kappa)$ eine entgegengesetzte Monotonie aufweisen, sind das lokale Minimum und das Maximum in $e_p(\kappa)$ allenfalls ganz schwach als Maximum und Minimum in $L^*(\kappa)$ zu erkennen. Ein so deutlicher funktionaler Zusammenhang zwischen der Entropieproduktionsrate e_p und dem Wert L^* , an dem die Entweichrate $\gamma(L)$ in Abschnitt 5.3 abrupt ihr Verhalten ändert, besteht jedoch nicht, wie die rechte Grafik von Abb. 7.11 zeigt. Der Parametersatz $\mathbf{p}_2(\kappa)$ beschreibt allerdings einen von $\mathbf{p}_1(\kappa)$ stark abweichenden Pfad durch den vierdimensionalen Parameterraum (vier der fünf Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i\pm 2}$, $p_{i\pm 1}$ und $p_{i,i}$ können frei gewählt werden), so daß unklar ist, welche Systemeigenschaften sich dabei ändern. Überdies bleibt die Frage, ob L^* überhaupt eine geeignete Größe zur Beschreibung des präasymptotischen Verhaltens darstellt.

⁵Diese Vergrößerung wird auch *coarse graining* genannt und liefert die richtigen Ergebnisse, wenn die beiden Gitterpunkte $i \in \mathcal{S}$ und $i+1 \in \mathcal{S}$, die einen neuen Gitterpunkt $\hat{i} \in \hat{\mathcal{S}}$ bilden, völlig äquivalent sind, also die gleiche Aufenthaltswahrscheinlichkeit für einen Random walk auf \mathcal{S} besitzen. Dies ist hier zumindest grob erfüllt.

⁶Die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten $\{p_{i,i-1}, p_{i,i}, p_{i,i+1}\}$ an jedem Gitterpunkt $i \in \hat{\mathcal{S}}$ sind dabei $\mathbf{q} = \{\frac{33}{80}, \frac{13}{40}, \frac{21}{80}\}$, $\bar{\mathbf{q}} = \{\frac{21}{80}, \frac{13}{40}, \frac{33}{80}\}$ und $\hat{\mathbf{q}} = \{\frac{27}{80}, \frac{13}{40}, \frac{27}{80}\}$, wobei \mathbf{q} und $\bar{\mathbf{q}}$ je mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{4}$ und der symmetrische Satz $\hat{\mathbf{q}}$ mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{2}$ auftreten.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung In der vorliegenden Arbeit wurde die verallgemeinerte binäre Unordnung auf verschiedene Eigenschaften des anomalen Transports hin untersucht, für die im Falle der Sinai-Unordnung analytische Ergebnisse existieren. Eine zentrale Eigenschaft von Systemen mit Sinai-Unordnung ist die als Golosov-Phänomen bekannte dynamische Lokalisierung, die zu einer vollständigen Unterdrückung der Diffusion führt. In Abschnitt 3.1 wurde dies auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung beobachtet.

Ferner existieren für die Sinai-Unordnung analytische Ergebnisse für das asymptotische Verhalten der mittleren quadratischen Versetzung

$$\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle} \propto \log^{2\alpha} t \quad \text{für } t \rightarrow \infty \quad (8.1)$$

der Zustandsdichte $N(\epsilon)$ der Relaxationsraten ϵ

$$N(\epsilon) = \frac{c}{|\log \epsilon|^\delta} \quad \text{für } \epsilon \rightarrow 0 \quad (8.2)$$

und der Entweichrate $\gamma(L)$

$$-\log \gamma(L) \propto L^\beta \quad \text{für } L \rightarrow \infty \quad (8.3)$$

mit den charakteristischen Exponenten $\alpha = \beta^{-1} = \delta = 2$. In den Abschnitten 3.2, 4.3.1 und 5.1.2 dieser Arbeit wurde numerisch gezeigt, daß sich Systeme mit verallgemeinerter binärer Unordnung, die auch direkte Übergänge zu den übernächsten Nachbarn erlauben, nach den gleichen asymptotischen Gesetzmäßigkeiten verhalten. Die charakteristischen Exponenten können somit ebenfalls definiert werden. Sie nehmen jedoch nur bei großer lokaler Asymmetrie etwa die Werte des Sinai-Falles an und weichen sonst teils erheblich davon ab. In Abb. 8.1 sind die so ermittelten charakteristischen Exponenten α , β und δ für die Übergangswahrscheinlichkeiten

$$\mathbf{p}_1 = \left\{ \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6} \right\} \quad (8.4)$$

und

$$\mathbf{p}_3 = \left\{ \kappa, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} - \kappa, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} \right\} \quad (8.5)$$

als Funktion von κ dargestellt. Der Parametersatz \mathbf{p}_1 wird bei $\kappa = \frac{1}{6}$ symmetrisch, \mathbf{p}_3 bei $\kappa = \frac{1}{4}$. Die topologische Unordnung aus [36, 34] ist mit $\kappa = 0$ in \mathbf{p}_3 enthalten. Dieser Zusammenstellung ist zu entnehmen, daß die charakteristischen Exponenten α , β^{-1} und δ auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung zusammenfallen, wobei mit abnehmender lokaler Asymmetrie die Koinzidenz der charakteristischen Exponenten weniger überzeugend numerisch gezeigt werden kann.

Durch die Arbeiten von Bolthausen und Goldscheid [51, 56] über die zufällige Irrfahrt auf einem Streifen, Abschnitt 3.3, ist für den Exponenten α aus Gleichung (8.1) seit kurzem analytisch bekannt, daß sich asymptotisch das Verhalten der Sinai-Unordnung mit $\alpha = 2$ einstellt. In Abb. 8.1 wird also das asymptotische Verhalten des Exponenten α nur für große lokale Asymmetrien richtig erfaßt. Die näherungsweise Bestimmung des maxi-

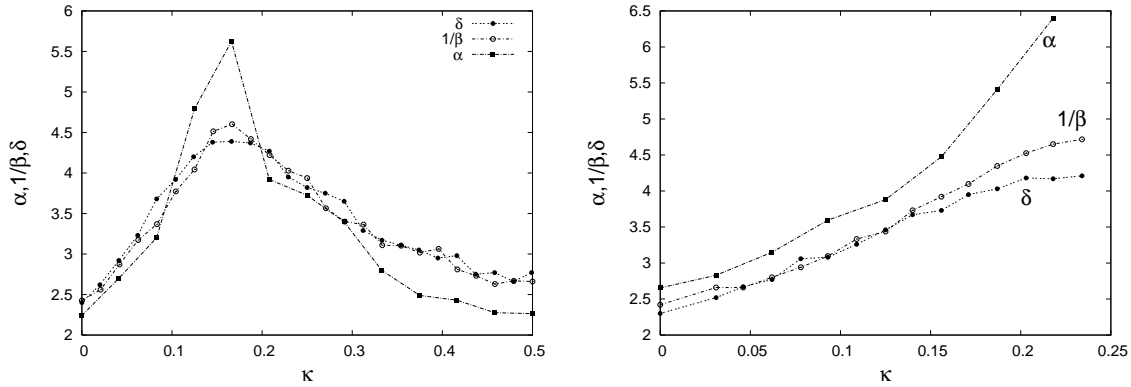


Abbildung 8.1: Zusammenstellung der charakteristischen Exponenten für die verallgemeinerte binäre Unordnung mit $\mathbf{p}_1 = \{\kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{2} - \kappa, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\}$ und $\mathbf{p}_3 = \{\kappa, \frac{1}{4}, \frac{1}{4} - \kappa, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\}$. Mit abnehmender lokaler Asymmetrie, der erste Parametersatz wird für $\kappa = \frac{1}{6}$ symmetrisch, der zweite bei $\kappa = \frac{1}{4}$, wird die Bestimmung der Exponenten zunehmend schwieriger und ungenauer. Der Exponent α ist numerisch am schlechtesten zu erfassen, da er einen deutlich höheren Rechenaufwand als β und δ erfordert.

malen Teiles des Spektrums der Übergangsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{L \times L}$ und damit der integrierten Zustandsdichte $N(\epsilon)$ bei kleinen Relaxationsraten ϵ in Abschnitt 4.3.2 erlaubte die Berechnung von $N(\epsilon)$ für deutlich größere Dimensionen L als in Abschnitt 4.3.1, wo die Matrix \mathbf{P} komplett diagonalisiert wurde. Dabei konnte für eine Vielzahl von Sätzen von Übergangswahrscheinlichkeiten numerisch gezeigt werden, daß auch der zugehörige Exponent δ den Wert $\delta = 2$ der Sinai-Unordnung annimmt. Dies läßt den Schluß zu, daß das asymptotische Verhalten der Sinai-Unordnung $\delta = 2$ ebenfalls für die verallgemeinerte binäre Unordnung universell gilt. Für das asymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$, Gleichung (8.3), ist schließlich mit der Störungsrechnung die Möglichkeit gegeben, wesentlich größere Systeme als über eine direkte Bestimmung von $\gamma(L)$ zu untersuchen. In Abschnitt 5.2.1 wurde gezeigt, daß die Störungsrechnung den Exponenten β bei Sinai-Unordnung richtig reproduziert, obwohl sie für die Entweichrate $\gamma(L)$ selbst keine sinnvolle Näherung darstellt (Abschnitt 5.2.3). Die Eignung der Störungsrechnung für die Bestimmung von β konnte für die verallgemeinerte binäre Unordnung dagegen nur numerisch in Abschnitt 5.2.4 gezeigt werden, wobei sich jedoch für große L wieder das Sinai-Verhalten mit $\beta^{-1} = 2$ einstellte. Daß in Abb.8.1 die größten Abweichungen von den theoretischen Ergebnissen der Sinai-Unordnung in der Nähe des symmetrischen Falles zu beobachten sind, wo auch bei der Sinai-Unordnung numerische Probleme auftreten, unterstreicht ebenfalls, daß auch für die verallgemeinerte binäre Unordnung asymptotisch $\alpha = \beta^{-1} = \delta = 2$ gilt.

Unterstützt wird dies ferner durch die in Kapitel 6 untersuchten Eigenschaften der stationären Dichte der verallgemeinerten binären Unordnung, die nicht maßgeblich von denen der stationären Dichte der Sinai-Unordnung abweichen. Der Hauptgrund für die ausführliche Betrachtung der stationären Dichte war jedoch das von der Störungsrechnung offenbarte ausgeprägte präasymptotische Verhalten der Entweichrate $\gamma(L)$ bei der verallgemeinerten binären Unordnung. Und zwar zeigte sich numerisch in Abschnitt 5.3, daß das Verhalten des Mittels $-\log \gamma(L)$ im präasymptotischen Fall ebenfalls Gleichung (8.3) jedoch mit $\beta^{-1} > 2$ genügt. Ein wesentlicher Unterschied beim Übergang zu direkten Sprüngen zu übernächsten Nachbarn liegt darin, daß dann im stationären Zustand i.a. Kreisströme auftreten und somit detaillierte Balance verletzt ist. Die Verletzung von detaillierter Balance wurde in Kapitel 7 quantifiziert. Dabei zeigte sich ein komplizierter Zusammenhang mit der an gleicher Stelle betrachteten, durch das präasymptotische Verhalten bestimmten Größe L^* . Hier sind allerdings weitere Untersuchungen notwendig.

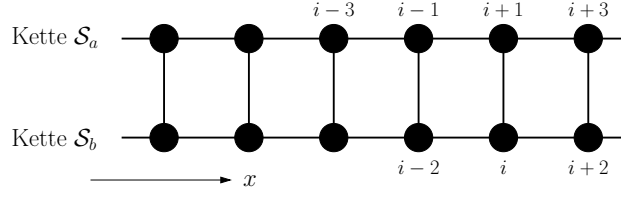


Abbildung 8.2: Die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Gitterpunkten $i \in \{\mathcal{S}_a, \mathcal{S}_b\}$ bilden eine Leiter mit rechteckigen Maschen. Die Variable x bezeichnet die Sprosse der Leiter.

Ausblick Abschließend soll noch diskutiert werden, wie die Arbeit weitergeführt werden kann. Eine naheliegende Erweiterung der bisher betrachteten Form der verallgemeinerten binären Unordnung, deren Übergangsgraph sich als Strickleiter mit dreieckigen Maschen (Abb. 2.6) darstellen läßt, stellt der Übergangsgraph mit rechteckigen Maschen in Abb. 8.2 dar. Sowohl die obere als auch die untere Reihe von Gitterpunkten werden dabei im folgenden als Kette bezeichnet. Dieses Modell enthält zwei exakt lösbare Spezialfälle, zum einen den sogenannten *Persistent random walk*, zum anderen normale Diffusion. Im Gegensatz zur verallgemeinerten binären Unordnung weisen aber nun Punkte in der oberen Kette \mathcal{S}_a einen anderen Satz von Übergangswahrscheinlichkeiten $p_{i,j}$ auf als Punkte der unteren Kette \mathcal{S}_b , da hier $p_{i,i+1} = 0$ für $i \in \mathcal{S}_a$ und $p_{i,i-1} = 0$ für $i \in \mathcal{S}_b$ gelten.

Der Persistent random walk ist ein stochastischer Prozeß, bei dem die Wahrscheinlichkeit für einen Sprung nach links bzw. rechts davon abhängt, in welche Richtung der vorherige Sprung erfolgte, wobei nur Sprünge zu unmittelbar benachbarten Punkten erlaubt sind. Demzufolge ist der Persistent random walk ein zweistufiger Markov-Prozeß, da die Richtung eines Sprunges direkt aus den beiden letzten besuchten Gitterpunkten folgt. In Abb. 8.2 ist er als Grenzfall enthalten, wenn die Wahrscheinlichkeiten, die Kette zu wechseln, konstant gewählt werden und in einer Kette nur Sprünge nach links und in der anderen nur Sprünge nach rechts erlaubt sind (siehe Abb. 8.3). Im Kontinuumslimites gilt dann die Telegraphengleichung

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \quad (8.6)$$

wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte $p(x, t)$ nicht mehr zwischen einem Punkt in der oberen Kette und dem direkt darunter liegenden unterscheidet (siehe Anhang A). Die Gleichung (8.6) wurde ursprünglich von Lord Kelvin für die Ausbreitung des elektrischen Feldes $\vec{E}(\vec{r}, t)$ in Leitern aufgestellt.¹ Sie folgt aus den Maxwellgleichungen $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{E} = 0$, $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \vec{E} + \mu_0 \vec{j}$, $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \times \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$ und $\vec{E} = \sigma \vec{j}$ für die Ausbreitung in x -Richtung. Einen Überblick über die Eigenschaften des Persistent random walk gibt u. a. das Buch von Weiss [76], die Anwendungen sind in [77] beschrieben. Zu beachten ist, daß das Lebowitz-Spohn-Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ und die Entropieproduktionsrate e_p für den Persistent random walk nicht definiert sind, da beide für jeden beliebigen Pfad die Existenz des Rückweges voraussetzen.

Der zweite lösbare Spezialfall des Übergangsgraphen von Abb. 8.2 ist ebenfalls ein translationssymmetrisches System, bei dem jedoch in beiden Ketten Sprünge sowohl nach links als auch nach rechts erlaubt sind. Ein solches System mit periodischen Randbedingungen wurde bereits in Abschnitt 7.2.2 betrachtet, wo das Wirkungsfunktional $e(\lambda)$ und die Entropieproduktionsrate e_p exakt bestimmt werden konnten. Bezeichne $a(x, t) \cdot dx$ die Wahrscheinlichkeit, im Intervall $(x, x + dx)$ zur Zeit t in der oberen Kette zu sein, und $b(x, t)$ die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte für die untere Kette. Dann lassen sich,

¹Konkret ging es damals um das erste Transatlantikkabel.

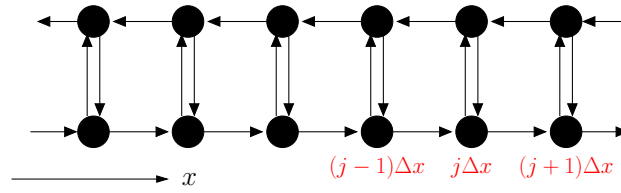


Abbildung 8.3: Sind in der Kette \mathcal{S}_a von Abb. 8.2 nur Sprünge nach links und in der Kette \mathcal{S}_b nur Sprünge nach rechts erlaubt, ergibt sich dieses Bild. Die Übergänge beim Persistent random walk sind von der Richtung des vorhergehenden Sprunges abhängig, d.h. hier, ob sich der Zufallswanderer in der oberen oder in der unteren Kette befindet.

wie in Anhang A gezeigt, für die Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichten in der oberen bzw. unteren Kette die partiellen Differentialgleichungen

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2T} [b(x, t) - a(x, t)] + v_a \frac{\partial a(x, t)}{\partial x} + D_a \frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial x^2} \quad (8.7)$$

$$\frac{\partial b(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2T} [a(x, t) - b(x, t)] + v_b \frac{\partial b(x, t)}{\partial x} + D_b \frac{\partial^2 b(x, t)}{\partial x^2} \quad (8.8)$$

angeben. Die Koeffizienten D_a , D_b sind dabei die Diffusionskonstanten in der oberen bzw. unteren Kette, die ebenso wie die Driftgeschwindigkeiten v_a , v_b nur von den Übergangswahrscheinlichkeiten in den jeweiligen Ketten abhängen. Die Wahrscheinlichkeit, die Kette zu wechseln, ist im Faktor T^{-1} enthalten.

Für die Gleichungen (8.7) und (8.8) kann die Schwerpunktsbewegung

$$\langle x(t) \rangle = \int x p(x, t) dx = -\frac{t}{2} (v_a + v_b) \quad (8.9)$$

bestimmt werden. Es ergibt sich demnach das zu erwartende Ergebnis, daß sich die Driftgeschwindigkeiten in der oberen und der unteren Kette additiv überlagern. Die mittlere quadratische Versetzung zeigt hingegen ein etwas anderes Verhalten als für die normale Fokker-Planck- bzw. Diffusionsgleichung:

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{(v_b - v_a)^2 T^2 \left(e^{-\frac{t}{T}} - 1 \right)}{2} + \quad (8.10)$$

$$+ \frac{t (v_b - v_a)^2 T}{2} + \frac{t^2 (v_a + v_b)^2}{4} + (D_a + D_b) t \quad (8.11)$$

Neben $(D_a + D_b)t$ tritt nun mit $\frac{t(v_b - v_a)^2 T}{2}$ noch ein weiterer Diffusionsterm auf, der im Kontext der Taylor-Diffusion bekannt ist. Aus den Arbeiten [78, 79] für ein ähnliches System können die beiden Diffusionskonstanten $(D_a + D_b)$ und $\frac{(v_b - v_a)^2 T}{2}$ ebenfalls direkt abgeleitet werden. Da dort allerdings das Ergebnis im Limes großer t bestimmt wurde, findet sich keine Entsprechung für den ersten Term von Gleichung (8.11).

Der naheliegendste Schritt, die bisher untersuchte Art der Unordnung auf Abb. 8.2 zu übertragen, ist die Modellierung der oberen und der unteren Kette jeweils als Umgebung mit Sinai-Unordnung. Gegenüber dem reinen Nächst Nachbar-Random-walk besitzt ein Zufallswanderer hier mehr Freiheitsgrade bei der Bewegung, indem er Potentialsenken der einen Kette auf der anderen umgehen kann. Die Bewegung wird offenkundig durch zusammenfallende Potentialsenken der beiden Ketten bestimmt, so daß sich wieder das Sinai-Verhalten einstellen sollte.² Interessanter mag in diesem Zusammenhang die Koppelung

²Und laut [56] für $\overline{\langle X_t^2(\omega) \rangle}$ auch einstellt.

von Unordnungsumgebungen der oberen und unteren Kette sein, die eine Vorzugsrichtung (*bias*) besitzen und damit nicht rekurrent sind. Für einen einzelnen solchen Random walk, der im Kontinuumslimit durch die Langevin-Gleichung

$$\frac{dx}{dt} = F(x) + \eta(t) \quad (8.12)$$

mit $\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2T\delta(t-t')$ und $\langle F(x)F(x') \rangle = \sigma\delta(x-x')$, $\langle F(x) \rangle = f$ beschrieben wird, kann man zeigen, daß es ein f_c gibt, das die Driftgeschwindigkeit v mit ($\mu = \frac{f}{f_c}$)

$$v = 0 \quad \text{für} \quad f < f_c \quad \text{und} \quad \overline{\langle x_t^2(\omega) \rangle} \propto t^{2\mu} \quad (8.13)$$

$$v \propto (f - f_c) \quad \text{für} \quad f > f_c \quad (8.14)$$

beeinflußt [80, 81].

Ein weiteres interessantes Phänomen von Random walks in Zufallsumgebungen ist, daß sie als vergleichsweise einfaches Modell bereits Alterung aufweisen. Die Korrelationsfunktionen $C(t, t_w)$ bzw. Antwortfunktionen $R(t, t_w)$ sind damit nicht nur von der Zeitdifferenz $t - t_w$, sondern auch von der absolut vergangenen Zeit t abhängig (siehe [34] und die dort angegebenen Literaturverweise). Für die Sinai-Unordnung ist das leicht nachzuvollziehen, da sich mit fortschreitender Zeit t der Zufallswanderer in immer tieferen Potentialmulden mit entsprechend längerer Entweichzeit befindet. Für das System von Gleichung (8.12) ergibt sich beispielsweise [60]:

$$\overline{\langle x(t) - x(0) \rangle} = Kt^\mu \quad (8.15)$$

$$\overline{\langle x(t) - x(t') \rangle} = K(t^\mu - t'^\mu) \propto K\mu \frac{t - t_w}{t_w^{1-\mu}} \quad (8.16)$$

A Zwei gekoppelte Irrfahrten

Der Übergangsgraph aus Abb. 8.2 kann auch als die Kopplung zweier eindimensionaler Irrfahrten, zum einen in der oberen zum anderen in der unteren Kette, interpretiert werden. Für den Fall der Translationssymmetrie in beiden Ketten sollen in Abschnitt A.1 im Kontinuumsimes die partiellen Differentialgleichungen für die Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $p(x, t)$ angegeben werden. Die ersten beiden Momente von $p(x, t)$ werden in Abschnitt A.2 bestimmt.

A.1 Fokker-Planck-Gleichung

A.1.1 Nomenklatur

Gegeben sei eine Doppelkette (bzw. in Anlehnung an Abschnitt 3.3 ein Streifen der Breite 2) von Gitterpunkten, wobei j das „Kettenglied“ kennzeichnet und a bzw. b angibt, ob es sich um den oberen oder den unteren Gitterpunkt handelt. Ein Gitterpunkt wird also durch $(z, j) \in \{a, b\} \times \mathbb{Z}$ wie in Abb. A.1 adressiert. Die Wahrscheinlichkeit, zum Zeitpunkt n am Punkt (z, j) zu sein, sei durch z_j^n gegeben.

Für die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(z_2, j_2 | z_1, j_1)$ vom Punkt (z_1, j_1) nach (z_2, j_2) wird folgendes vereinbart:

Die Wahrscheinlichkeit, im nächsten Schritt von (a, j) nach $(a, j - 1)$ oder $(b, j - 1)$ zu springen, sei A^- , jene von (a, j) nach (a, j) oder (b, j) sei A und die Wahrscheinlichkeit für einen Sprung von (a, j) nach $(a, j + 1)$ oder $(b, j + 1)$ sei A^+ . Damit ist also A^+ die Wahrscheinlichkeit für einen in der oberen Kette befindlichen Zufallswanderer, im nächsten Schritt ins benachbarte rechte Kettenglied zu springen. Die entsprechenden, den Gitterpunkten (b, j) zugeordneten Wahrscheinlichkeiten werden mit B bezeichnet. Andere Übergänge seien nicht gestattet. Damit gilt

$$\sum_z P(z, j_1 | a, j) = \begin{cases} A^+ & , j_1 = j + 1 \\ A & , j_1 = j \\ A^- & , j_1 = j - 1 \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

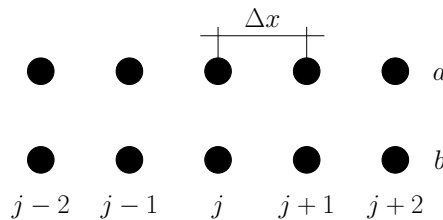


Abbildung A.1: Punkte in der oberen Kette sind durch a gekennzeichnet, Punkte in der unteren Kette durch b , die Kettenglieder durch $j \in \mathbb{Z}$. Der Gitterabstand ist Δx .

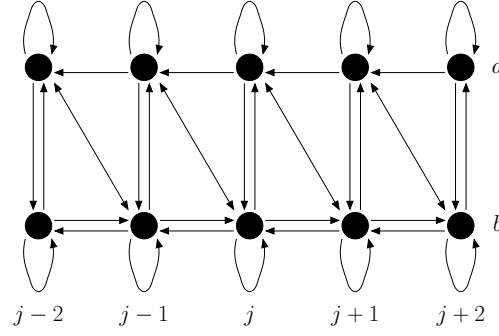


Abbildung A.2: Übergangsgraph der Wahrscheinlichkeiten (A.7-A.10)

bzw.

$$\sum_z P(z, j_1 | b, j) = \begin{cases} B^+ & , j_1 = j + 1 \\ B & , j_1 = j \\ B^- & , j_1 = j - 1 \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Nachdem die Richtung des Sprunges $j \rightarrow j_2$ festgelegt wurde, wird überprüft, ob dabei die Kette gewechselt werden kann. Besteht die Wahl für $z_2 = a$ oder $z_2 = b$, d.h. $P(z_2 = a | j_2) > 0$ und $P(z_2 = b | j_2) > 0$, so wird mit Wahrscheinlichkeit α gewechselt, d.h. $z_2 \neq z_1$, und mit Wahrscheinlichkeit β bleibt $z_2 = z_1$. Oder anders ausgedrückt: Es gibt zwei mögliche Kombinationen von Wahrscheinlichkeiten zum Wechseln der Kette $P(z_2 \neq z_1 | j_2)$ bzw. zum Bleiben $P(z_2 = z_1 | j_2)$:

$$\left\{ P(z_2 = z_1 | j_2), P(z_2 \neq z_1 | j_2) \right\} = \begin{cases} \{\beta, \alpha\} & (j_1, z_1) \rightarrow (j_2, z_2) \\ \{0, 1\} & (j_1, z_1) \nrightarrow (j_2, z_2) \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Das ganze System ist normiert für

$$A^- + A + A^+ = 1 \quad (\text{A.4})$$

$$B^- + B + B^+ = 1 \quad (\text{A.5})$$

$$\alpha + \beta = 1 \quad (\text{A.6})$$

Die Trennung der Wahrscheinlichkeiten in $\{A^-, A, A^+\}$ und $\{B^-, B, B^+\}$ von $\{\alpha, \beta\}$ erfolgt deshalb, da erstere mit dem Gitterabstand Δx verknüpft sind und letztere mit der Zeit Δt zwischen zwei Sprüngen. Sie verhalten sich daher beim Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$, $\Delta x \rightarrow 0$ unterschiedlich.

Um die eingeführte Nomenklatur zu verdeutlichen, soll ein Beispiel betrachtet werden. Es seien Übergänge wie in der Skizze A.2 gestattet. Exemplarisch gilt damit für die Übergangswahrscheinlichkeiten für Übergänge von Punkten (z, j) nach (z_2, j_2) :

$$P(a, j | a, j) = \left(\sum_{z_2} P(z_2, j | a, j) \right) P(z_2 = a | j_2 = j) = A\beta \quad (\text{A.7})$$

$$P(a, j - 1 | a, j) = \left(\sum_{z_2} P(z_2, j - 1 | a, j) \right) \underbrace{P(z_2 = a | j_2 = j - 1)}_1 = A^- \quad (\text{A.8})$$

$$P(a, j + 1 | b, j) = 0 \quad (\text{A.9})$$

$$P(a, j - 1 | b, j) = \left(\sum_{z_2} P(z_2, j - 1 | b, j) \right) P(z_2 = a | j_2 = j - 1) = B^- \alpha \quad (\text{A.10})$$

A Zwei gekoppelte Irrfahrten

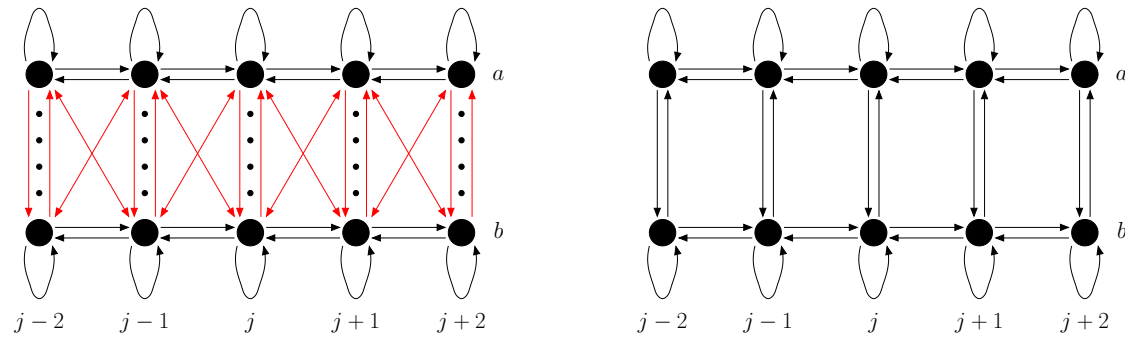


Abbildung A.3: Links: Zweistufiger Markovprozeß, bei dem im Wechsel der Sprung in einer Kette und der Übergang zwischen den Ketten bestimmt werden. Dies ist äquivalent zu einem einstufigen Prozeß, bei dem in jedem Zeitschritt sowohl die schwarzen als auch die roten Übergänge gestattet sind. Rechts: Analog zu Abb. 8.2 kann der Wechsel der Kette nur erfolgen, wenn der Zufallswanderer im Kettenglied j verbleibt. Es sind damit weniger Übergänge als in der linken Grafik möglich.

Eine vollständige Übersicht über alle von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten gibt die folgende Tabelle. Die Sprünge erfolgen dabei von einem Punkt in der linken Spalte zu einem Punkt in der Kopfzeile:

	$(a, j-1)$	(a, j)	$(a, j+1)$	$(b, j-1)$	(b, j)	$(b, j+1)$
(a, j)	A^-	βA	0	0	αA	A^+
(b, j)	αB^-	αB	0	βB^-	βB	B^+

Den Gleichungen (A.4-A.6) ist zu entnehmen, daß die Tabelle lediglich 5 unabhängige Einträge besitzt (A, A^+, B, B^+ und α). Im allgemeinen Fall muß lediglich die Zeilensumme 1 sein, so daß prinzipiell 10 Einträge frei wählbar sind.

Der Kontinuumsfall soll für den Fall bestimmt werden, daß jede der beiden Ketten für sich einen Nächstnachbar-Random-walk mit konstanten Übergangswahrscheinlichkeiten an jedem Gitterpunkt darstellt. Die Kopplung der Irrfahrten der oberen und der unteren Kette kann nun auf zwei unterschiedliche Arten erfolgen. Die erste Variante besteht darin, den Markovprozeß als zweistufig zu betrachten, d.h., der Zufallswanderer springt zunächst zum neuen Gitterpunkt in der Kette, in der er gerade ist. An dem neuen Gitterpunkt wird dann gewählt, ob die Kette zu wechseln ist oder nicht. Das Vorgehen ist als das schwarze Gerüst von Abb. A.3 (links) gegeben. Der Abbildung ist ferner zu entnehmen, daß das beschriebene Verfahren auch als einstufiger Zufallsprozeß betrachtet werden kann, bei dem in jedem Zeitschritt sowohl die schwarzen als auch die roten Übergänge gestattet sind. Eine andere Möglichkeit der Kopplung der Irrfahrten der oberen und unteren Kette ist in Abb. A.3 (rechts) zu sehen, die dem Übergangsgraphen aus Abb. 8.2 entspricht. Hier ist der Wechsel der Kette nur gestattet, wenn sich das „Kettenglied“ j nicht ändert. Beide Varianten unterscheiden sich also deutlich in den erlaubten Übergängen, zeigen aber das gleiche Verhalten im Kontinuumsfall, wie im folgenden zu sehen ist.

A.1.2 Zweistufiger Zufallsprozeß

Für Abb. A.3 (links) lauten die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten für einen Sprung von der linken Spalte nachstehender Tabelle in die Kopfzeile:

	$(a, j-1)$	(a, j)	$(a, j+1)$	$(b, j-1)$	(b, j)	$(b, j+1)$
(a, j)	βA^-	βA	βA^+	αA^-	αA	αA^+
(b, j)	αB^-	αB	αB^+	βB^-	βB	βB^+

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten im $(n+1)$ -ten Zeitschritt a_j^{n+1} und b_j^{n+1} sind damit

$$a_j^{n+1} = \beta [A^+ a_{j-1}^n + A^- a_{j+1}^n + (1 - A^+ - A^-) a_j^n] + \alpha [B^+ b_{j-1}^n + B^- b_{j+1}^n + (1 - B^+ - B^-) b_j^n] \quad (\text{A.11})$$

$$b_j^{n+1} = \beta [B^+ b_{j-1}^n + B^- b_{j+1}^n + (1 - B^+ - B^-) b_j^n] + \alpha [A^+ a_{j-1}^n + A^- a_{j+1}^n + (1 - A^+ - A^-) a_j^n] \quad (\text{A.12})$$

Mit der Ersetzung $a_j^n = a(x, t)$ bzw. $b_j^n = b(x, t)$ mit $x = j\Delta x$ und $t = n\Delta t$ und wird eine Taylorentwicklung aller Ausdrücke

$$a_{j'}^{n'} = a(x + (j' - j)\Delta x, t + (n' - n)\Delta t) \quad (\text{A.13})$$

$$b_{j'}^{n'} = b(x + (j' - j)\Delta x, t + (n' - n)\Delta t) \quad (\text{A.14})$$

um $a(x, t)$ bzw. $b(x, t)$ bis zur Ordnung $(\Delta x)^2$ und Δt durchgeführt und anschließend durch Δt dividiert. Bei Verzicht auf die explizite Angabe der Abhängigkeiten $a = a(x, t)$ und $b = b(x, t)$ und Beachtung von $\beta = 1 - \alpha$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= \frac{\alpha}{\Delta t}(b - a) + \beta \frac{\Delta x}{\Delta t}(A^- - A^+) \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(A^+ + A^-) \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \\ &+ \alpha \frac{\Delta x}{\Delta t}(B^- - B^+) \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{\alpha}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(B^+ + B^-) \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial b}{\partial t} &= \frac{\alpha}{\Delta t}(a - b) + \beta \frac{\Delta x}{\Delta t}(B^- - B^+) \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{\beta}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(B^+ + B^-) \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + \\ &+ \alpha \frac{\Delta x}{\Delta t}(A^- - A^+) \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{\alpha}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(A^+ + A^-) \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Der Term $\frac{\alpha}{\Delta t}(b - a)$ bleibt endlich bei $\Delta t \rightarrow 0$ für $\alpha = \frac{\Delta t}{2T}$. Setzt man dies in die Gleichungen (A.15) und (A.16) ein und vernachlässigt alle Terme, die nur im Zähler und nicht im Nenner Δx oder Δt enthalten, folgt

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{1}{2T}(b - a) + \frac{\Delta x}{\Delta t}(A^- - A^+) \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(A^+ + A^-) \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \frac{1}{2T}(a - b) + \frac{\Delta x}{\Delta t}(B^- - B^+) \frac{\partial b}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(B^+ + B^-) \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} \quad (\text{A.18})$$

Der Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta t \rightarrow 0$ werde so durchgeführt, daß $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}$ endlich bleibt. Daraus folgt, daß $(A^- - A^+) \propto \Delta x$ bzw. $(B^- - B^+) \propto \Delta x$. Mit $\frac{\Delta x}{\Delta t}(A^- - A^+) = v_a$, $\frac{\Delta x}{\Delta t}(B^- - B^+) =$

v_b , $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(A^+ + A^-) = D_a$ und $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}(B^+ + B^-) = D_b$ erhält man

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{1}{2T}(b - a) + v_a \frac{\partial a}{\partial x} + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \frac{1}{2T}(a - b) + v_b \frac{\partial b}{\partial x} + D_b \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} \quad (\text{A.20})$$

Kann nicht zwischen oberer und unterer Kette unterschieden werden, so ist die zu beobachtende Größe $p(x, t) = a(x, t) + b(x, t)$. Für $v_a = v_b = v$ und $D_a = D_b = D$ ergibt sich dann die normale Diffusionsgleichung für einen Random Walk mit Drift:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = v \frac{\partial p}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (\text{A.21})$$

Aus den Gleichungen (A.17) und (A.18) läßt sich ebenfalls als Spezialfall die Telegraphengleichung für den Persistent random walk ableiten, für den $A^+ = B^-$ und $A^- = B^+ = 0$ gilt. Wenn der Grenzübergang $\Delta x \rightarrow 0, \Delta t \rightarrow 0$ für die entsprechend abgeänderten Gleichungen (A.17) und (A.18) wiederum so durchführt wird, daß $\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \rightarrow D$ gilt, bleiben $\frac{\Delta x}{\Delta t} A^+$ und $\frac{\Delta x}{\Delta t} B^-$ nur für $A^+ \propto \Delta x$ und $B^- \propto \Delta x$ beschränkt. Die zweiten Ableitungen des Ortes verschwinden folglich, und man erhält mit $\frac{\Delta x}{\Delta t} A^+ \equiv -v$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{1}{2T}(b - a) - v \frac{\partial a}{\partial x} \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = \frac{1}{2T}(a - b) + v \frac{\partial b}{\partial x} \quad (\text{A.23})$$

Die zu beobachtende Größe sei wieder $p(x, t) = a(x, t) + b(x, t)$. Mit der Definition $w(x, t) = a(x, t) - b(x, t)$ ergibt sich durch Addition bzw. Subtraktion der Gleichungen (A.22) und (A.23)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial w}{\partial x} \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{w}{T} \quad (\text{A.25})$$

Gleichung (A.25) kann in Termen von $p(x, t)$ durch Variation der Konstanten, d.h. durch den Ansatz $w(x, t) = C(t, x) \exp[\frac{-t}{T}]$, gelöst werden. Aus Gleichung (A.25) folgt damit

$$w(x, t) = - \int_0^t v \frac{\partial p(x, t')}{\partial x} e^{\frac{t'}{T}} dt' \cdot e^{\frac{-t}{T}} \quad (\text{A.26})$$

womit sich für Gleichung (A.24)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = v^2 \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \frac{\partial p(x, t')}{\partial x} e^{\frac{t'}{T}} dt' \cdot e^{\frac{-t}{T}} \quad (\text{A.27})$$

ergibt. Das Integral verschwindet, wenn beide Seiten partiell nach t abgeleitet werden:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{v^2}{T} \int_0^t \frac{\partial^2 p(x, t')}{\partial x^2} e^{\frac{t'}{T}} dt' \cdot e^{\frac{-t}{T}} \quad (\text{A.28})$$

Der Vergleich mit Gleichung (A.27) ergibt die Telegraphengleichung¹

$$\frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial t^2} + \frac{1}{T} \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2} \quad (\text{A.29})$$

A.1.3 Einstufiger Zufallsprozeß

Die von null verschiedenen Übergangswahrscheinlichkeiten für Abb. A.3 (rechts) für Sprünge aus der linken Spalte in die Kopfzeile lauten

	$(a, j-1)$	(a, j)	$(a, j+1)$	$(b, j-1)$	(b, j)	$(b, j+1)$
(a, j)	A^-	βA	A^+	0	αA	0
(b, j)	0	αB	0	B^-	βB	B^+

womit für die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

$$a_j^{n+1} = A^+ a_{j-1}^n + A^- a_{j+1}^n + (1 - A^+ - A^-) a_j^n + \alpha(1 - B^+ - B^-) b_j^n \quad (\text{A.30})$$

$$b_j^{n+1} = B^+ b_{j-1}^n + B^- b_{j+1}^n + (1 - B^+ - B^-) b_j^n + \alpha(1 - A^+ - A^-) a_j^n \quad (\text{A.31})$$

gilt. Mit dem gleichen Vorgehen wie im Anschluß an Gleichung (A.12), d.h. der Taylorentwicklung bis zur Ordnung $(\Delta x)^2$ und Δt , ergibt sich hieraus

$$a + \Delta t \frac{\partial a}{\partial t} = [A^+ + A^- + (1 - A^+ - A^-)\beta] a + (A^- - A^+) \Delta x \frac{\partial a}{\partial x} + (A^+ + A^-) \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + (1 - B^+ - B^-) \alpha b \quad (\text{A.32})$$

$$b + \Delta t \frac{\partial b}{\partial t} = [B^+ + B^- + (1 - B^+ - B^-)\beta] b + (B^- - B^+) \Delta x \frac{\partial b}{\partial x} + (B^+ + B^-) \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + (1 - A^+ - A^-) \alpha a \quad (\text{A.33})$$

woraus mit $\beta = 1 - \alpha$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = [A^+ + A^- - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} a + (A^- - A^+) \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial a}{\partial x} + (A^+ + A^-) \frac{(\Delta x)^2}{2 \Delta t} \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + (1 - B^+ - B^-) \frac{\alpha}{\Delta t} b \quad (\text{A.34})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = [B^+ + B^- - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} b + (B^- - B^+) \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial b}{\partial x} + (B^+ + B^-) \frac{(\Delta x)^2}{2 \Delta t} \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + (1 - A^+ - A^-) \frac{\alpha}{\Delta t} a \quad (\text{A.35})$$

¹Die Telegraphengleichung kann auch durch partielles Ableiten von Gleichung (A.24) nach der Zeit erhalten werden:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = -v \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial w}{\partial t} \right)$$

Mit Gleichung (A.25) für $\frac{\partial w}{\partial t}$ folgt

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{v}{T} \frac{\partial w}{\partial x}$$

Der Ausdruck $\frac{\partial w}{\partial x}$ kann durch Gleichung (A.24) ersetzt werden, womit sich ebenfalls die Telegraphengleichung (A.29) ergibt.

folgt. Die rechten Seiten der Gleichungen (A.34) und (A.35) bleiben nur endlich für

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} (B^- - B^+) \frac{\Delta x}{\Delta t} = v_b \quad \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} (A^- - A^+) \frac{\Delta x}{\Delta t} = v_a \quad (\text{A.36})$$

$$\lim_{\Delta t, \Delta x \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} = D \quad (\text{A.37})$$

weswegen wieder $A^- - A^+ \propto \Delta x$, $B^- - B^+ \propto \Delta x$ und $\alpha \propto \frac{\Delta t}{2T}$ gelten. Mit $A^+ + A^- = A^0$ und $B^+ + B^- = B^0$ ergibt sich damit

$$\frac{\partial a}{\partial t} = [A^0 - 1] \frac{a}{2T} + v_a \frac{\partial a}{\partial x} + A^0 D \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + (1 - B^0) \frac{b}{2T} \quad (\text{A.38})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = [B^0 - 1] \frac{b}{2T} + v_b \frac{\partial b}{\partial x} + B^0 D \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + (1 - A^0) \frac{a}{2T} \quad (\text{A.39})$$

Die Gleichungen (A.38) und (A.39) enthalten als Spezialfall die Diffusionsgleichung für $A^0 = B^0$, $v_a = v_b$, wie durch Addition von (A.38) und (A.39) mit $p(x, t) = a(x, t) + b(x, t)$ zu sehen ist:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 2v_a \frac{\partial p}{\partial x} + 2A^0 D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (\text{A.40})$$

Der Persistent random walk ist in den Gleichungen (A.34) und (A.35) mit $A^+ = B^- \neq 0$ und $A^- = B^+ = 0$ enthalten:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = [A^+ - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} a - A^+ \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial a}{\partial x} + A^+ \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + (1 - A^+) \frac{\alpha}{\Delta t} b \quad (\text{A.41})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = [A^+ - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} b + A^+ \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial b}{\partial x} + A^+ \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + (1 - A^+) \frac{\alpha}{\Delta t} a \quad (\text{A.42})$$

Es muß offensichtlich $A^+ \propto \Delta x$ gelten, so daß die Ableitungen zweiter Ordnung verschwinden:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = [A^+ - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} (a - b) - A^+ \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial a}{\partial x} \quad (\text{A.43})$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = [A^+ - 1] \frac{\alpha}{\Delta t} (b - a) + A^+ \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial b}{\partial x} \quad (\text{A.44})$$

Der Grenzübergang ist so durchzuführen, daß

$$\lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} A^+ \frac{\Delta x}{\Delta t} = v \quad \text{und} \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\alpha}{\Delta t} = 2T \quad (\text{A.45})$$

gilt. Damit wird $A^+ - 1 = 1$ für $\Delta x \rightarrow 0$, und man erhält das Differentialgleichungssystem der Gleichungen (A.22) und (A.23), für das in Abschnitt A.1.2 die Telegraphengleichung abgeleitet wurde.

A.2 Lösung

Über die charakteristische Funktion sollen die ersten beiden Momente von $p(x, t) = a(x, t) + b(x, t)$ aus den Differentialgleichungen (A.22) und (A.23) bestimmt werden.

A.2.1 Charakteristische Funktion

Die Fouriertransformierten von $a(x, t)$ und $b(x, t)$ sind gegeben durch:

$$a(x, t) = \int \int \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega \quad (\text{A.46})$$

$$b(x, t) = \int \int \hat{b}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega \quad (\text{A.47})$$

Einsetzen in die Gleichungen (A.22) und (A.22) liefert unter Beachtung von

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = \int \int \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega = - \int \int i\omega \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega \quad (\text{A.48})$$

$$\frac{\partial a(x, t)}{\partial x} = \int \int \frac{\partial}{\partial x} \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega = i \int \int k \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega \quad (\text{A.49})$$

$$\frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial x^2} = \int \int \frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega = - \int \int k^2 \hat{a}(k, \omega) e^{ikx - i\omega t} dk d\omega \quad (\text{A.50})$$

und Rücktransformation:

$$-i\omega \hat{a} = \frac{1}{2T} (\hat{b} - \hat{a}) + v_a i k \hat{a} - D_a k^2 \hat{a} \quad (\text{A.51})$$

$$-i\omega \hat{b} = \frac{1}{2T} (\hat{a} - \hat{b}) + v_b i k \hat{b} - D_b k^2 \hat{b} \quad (\text{A.52})$$

Dies kann als Matrixgleichung geschrieben werden

$$\underbrace{\begin{pmatrix} -i\omega + \frac{1}{2T} - v_a i k + D_a k^2 & -\frac{1}{2T} \\ -\frac{1}{2T} & -i\omega + \frac{1}{2T} - v_b i k + D_b k^2 \end{pmatrix}}_{T(k, \omega)} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.53})$$

für die es nur nichttriviale Lösungen für $\det T(k, \omega) = 0$, d.h.

$$0 = (i\omega)^2 - i\omega \left(\frac{1}{T} - ik[v_a + v_b] + k^2[D_a + D_b] \right) + \quad (\text{A.54})$$

$$+ \left(\frac{1}{2T} - v_a i k + D_a k^2 \right) \left(\frac{1}{2T} - v_b i k + D_b k^2 \right) - \frac{1}{4T^2} \quad (\text{A.55})$$

gibt. Mit $v = v_a + v_b$ und $D = D_a + D_b$ gilt damit für $i\omega$

$$(i\omega)_{1/2} = \frac{\frac{1}{T} - ikv + k^2 D}{2} \pm \sqrt{\frac{(\frac{1}{T} - ikv + k^2 D)^2}{4} + \frac{k[iv - Dk]}{2T} + ik^3[v_a D_b + v_b D_a] + v_a v_b k^2} \quad (\text{A.56})$$

A.2.2 Mittelwert

Mit den Definitionen

$$\mu_a(t) \equiv \int x a(x, t) dx \quad \mu_b(t) \equiv \int x b(x, t) dx \quad (\text{A.57})$$

$$N_a(t) \equiv \int a(x, t) dx \quad N_b(t) \equiv \int b(x, t) dx \quad (\text{A.58})$$

werden beide Seiten der Gleichungen (A.22) und (A.23) mit x multipliziert und anschließend über den gesamten Raum integriert:

$$\frac{\partial \mu_a}{\partial t} = \frac{1}{2T}(\mu_b - \mu_a) + v_a \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial a}{\partial x} dx + D_a \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} dx \quad (\text{A.59})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2T}(\mu_b - \mu_a) + v_a \left(xa(x, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} a(x, t) dx \right) + \\ &\quad + D_a \left(x \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial a}{\partial x} dx \right) \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

$$= \frac{1}{2T}(\mu_b(t) - \mu_a(t)) - v_a N_a(t) \quad (\text{A.61})$$

$$\frac{\partial \mu_b}{\partial t} = \frac{1}{2T}(\mu_a(t) - \mu_b(t)) - v_b N_b(t) \quad (\text{A.62})$$

Bei den Gleichungen (A.61) und (A.62) handelt es sich um ein lineares inhomogenes Differentialgleichungssystem der Form

$$\frac{d}{dt} \vec{\mu}(t) = A \vec{\mu}(t) + \vec{v}(t) \quad (\text{A.63})$$

mit

$$\vec{\mu}(t) = \begin{pmatrix} \mu_a(t) \\ \mu_b(t) \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2T} & \frac{1}{2T} \\ \frac{1}{2T} & -\frac{1}{2T} \end{pmatrix} \quad \vec{v}(t) = \begin{pmatrix} -v_a N_a(t) \\ -v_b N_b(t) \end{pmatrix}$$

Die Lösung läßt sich u.a. durch Variation der Konstanten bestimmen, d.h. den Ansatz

$$\vec{\mu}(t) = e^{At} \vec{c}(t) \quad (\text{A.64})$$

der in Gleichung (A.63) eingesetzt für die Konstante

$$\vec{c}(t) = \int e^{-At} \vec{v}(t) dt \quad (\text{A.65})$$

liefert. Die Anfangsbedingungen seien durch $\mu_a(0) = \mu_b(0) = 0$ und $N_a(0) = N_b(0) = \frac{1}{2}$ gegeben. Die Anfangsverteilung soll also bei $x = 0$ konzentriert sein und sich im Gleichgewicht zwischen oberer (a) und unterer Kette (b) befinden. Da die Übergangsraten von a nach b und umgekehrt für alle Zeiten gleich $\frac{1}{2T}$ sind, bleibt folglich auch $N_a(t) = N_b(t) = \frac{1}{2}$ für alle Zeiten $t \geq 0$.

Die Lösung des Differentialgleichungssystems (A.61) und (A.62) ergibt sich damit zu

$$m_a(t) = -\frac{(v_b - v_a)T}{4} e^{-\frac{t}{T}} + \frac{(v_b - v_a)T}{4} - \frac{tv_b}{4} - \frac{tv_a}{4} \quad (\text{A.66})$$

$$m_b(t) = \frac{(v_b - v_a)T}{4} e^{-\frac{t}{T}} - \frac{(v_b - v_a)T}{4} - \frac{tv_b}{4} - \frac{tv_a}{4} \quad (\text{A.67})$$

woraus für die eigentliche Beobachtungsgröße $\langle x \rangle(t)$

$$\langle x(t) \rangle = \int x p(x, t) dx = \int x [a(x, t) + b(x, t)] dx = \mu_a(t) + \mu_b(t) = -\frac{t}{2}(v_a + v_b) \quad (\text{A.68})$$

folgt.

A.2.3 Varianz

Mit den zusätzlichen Definitionen

$$\alpha(t) = \int x^2 a(x, t) dx \quad (\text{A.69})$$

$$\beta(t) = \int x^2 b(x, t) dx \quad (\text{A.70})$$

werden beide Seiten der Gleichungen (A.22) und (A.23) mit x^2 multipliziert. Die anschließende Integration über den gesamten Raum liefert

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{1}{2T}(\beta - \alpha) + v_a \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{\partial a}{\partial x} dx + D_a \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} dx \quad (\text{A.71})$$

$$= \frac{1}{2T}(\beta - \alpha) + v_a \left(x^2 a(x, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} 2x a(x, t) dx \right) + \quad (\text{A.72})$$

$$+ D_a \left(x^2 \frac{\partial a}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} 2x \frac{\partial a}{\partial x} dx \right) \quad (\text{A.73})$$

$$= \frac{1}{2T}(\beta(t) - \alpha(t)) - 2v_a \mu_a(t) - 2D_a \left(x a(x, t) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} a(x, t) dx \right) \quad (\text{A.74})$$

$$= \frac{1}{2T}(\beta(t) - \alpha(t)) - 2v_a \mu_a(t) + 2D_a N_a(t) \quad (\text{A.75})$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = \frac{1}{2T}(\alpha(t) - \beta(t)) - 2v_b \mu_b(t) + 2D_b N_b(t) \quad (\text{A.76})$$

Die Gleichungen (A.75) und (A.76) bilden wiederum ein inhomogenes lineares Differentialgleichungssystem wie Gleichung (A.63), das durch Variation der Konstanten gelöst werden kann. In Anbetracht der vielen Koeffizienten empfiehlt sich die Zuhilfenahme eines algebraischen Mathematikprogrammes (hier: Maxima), womit sich mit den zur Berechnung der Schwerpunktsbewegung (A.66), (A.67) korrespondierenden Anfangsbedingungen $\alpha(0) = \beta(0) = 0$ und $N_a(0) = N_b(0) = 0$ als Lösung

$$\alpha(t) = \frac{\left((v_b - v_a)^2 T^2 + (2D_b - 2D_a) T \right) \left(e^{-\frac{t}{T}} - 1 \right)}{4} + \frac{t (v_b^2 - v_a^2) T e^{-\frac{t}{T}}}{4} - \frac{t (v_a v_b - v_a^2) T}{2} + \frac{t^2 (v_a + v_b)^2}{8} + \frac{D_b t}{2} + \frac{D_a t}{2} \quad (\text{A.77})$$

$$\beta(t) = \frac{\left((v_b - v_a)^2 T^2 + (2D_a - 2D_b) T \right) \left(e^{-\frac{t}{T}} - 1 \right)}{4} - \frac{t (v_b^2 - v_a^2) T e^{-\frac{t}{T}}}{4} + \frac{t (v_b^2 - v_a v_b) T}{2} + \frac{t^2 (v_a + v_b)^2}{8} + \frac{D_b t}{2} + \frac{D_a t}{2} \quad (\text{A.78})$$

ergibt. Die mittlere quadratische Versetzung ist damit durch

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{(v_b - v_a)^2 T^2 \left(e^{-\frac{t}{T}} - 1 \right)}{2} + \quad (\text{A.79})$$

$$+ \frac{t (v_b - v_a)^2 T}{2} + \frac{t^2 (v_a + v_b)^2}{4} + (D_a + D_b) t \quad (\text{A.80})$$

gegeben.

Literaturverzeichnis

- [1] Fourier J. *Théorie Analytique de la Chaleur* (Firmin Didot, Paris, 1822).
- [2] Herivel J. *Joseph Fourier. The Man and the Physicist* (Clarendon Press, Oxford, 1975).
- [3] Vogl G. *Wandern ohne Ziel. Von der Atomdiffusion zur Ausbreitung von Lebewesen und Ideen* (Springer, Berlin, 2007).
- [4] Fick A. *Über Diffusion*. Z. rat. Medicin, (1855) 288–301.
- [5] Fick A. *Über Diffusion*. Annalen der Physik und Chemie, **94** (1855) 59–81.
- [6] Brown R. *A brief account of microscopical observations made in the months of june, july and august, 1827, on the particles contained in the pollens of plants; and the general existence of active molecules in organic and inorganic bodies*. Phil. Mag. New Series, **4** (1828) 161–173.
- [7] Einstein A. *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*. Annalen der Physik, **17** (1905) 549–560.
- [8] Smoluchowski M.v. *Zur kinetischen Theorie der Brownschen Molekularbewegung und der Suspension*. Annalen der Physik, **21** (1906) 756–780.
- [9] Perrin J. *Die Atome* (Verlag Theodor Steinkopf, Dresden und Leipzig, 1923).
- [10] Kirchner J.W., Feng X., Neal C. *Fractal stream chemistry and its implications for contaminant transport in catchments*. Nature, **403** (2000) 524–527.
- [11] Ritchie K., Shan X.Y., Kondo J., Iwasawa K., Fujiwara T., Kusumi A. *Detection of non-brownian diffusion in the cell membrane in single molecule tracking*. Biophysical Journal, **88** (2005) 2266–2277.
- [12] Klafter J., Sokolov I. *Anomalous diffusion spreads its wings*. Physics World, **18** (2005) 29–32.
- [13] La Porta A., Voth G.A., Crawford A.M., Alexander J., Bodenschatz E. *Fluid particle accelerations in fully developed turbulence*. Nature, **409** (2001) 1017–1019.
- [14] Brockmann D., Hufnagel L., Geisel T. *The scaling laws of human travel*. Nature, **439** (2006) 462–465.
- [15] Vogl G., Sepiol B. *The elementary diffusion step in metals studied by the interference of gamma-rays, x-rays and neutrons*. In P. Heitjans, J. Kärger (Hrsg.), *Diffusion in Condensed Matter* (Springer, Berlin).
- [16] Geisel T., Nierwetberg J. *Onset of diffusion and universal scaling in chaotic systems*. Phys. Rev. Lett, **48** (1982) 7.

- [17] Schell M., Fraser S., Kapral R. *Diffusive dynamics in systems with translational symmetry: A one-dimensional-map model*. Phys. Rev. A, **26** (1982) 504–521.
- [18] Fujisaka H., Grossmann S. *Chaos-induced diffusion in nonlinear discrete dynamics*. Z. Phys. B, **48** (1982) 261–275.
- [19] Grossmann S., Fujisaka H. *Diffusion in discrete nonlinear dynamical systems*. Phys. Rev. A, **26** (1982) 1779–1782.
- [20] Geisel T., Thomae S. *Anomalous diffusion in intermittent chaotic systems*. Phys. Rev. Lett., **52** (1984) 1936.
- [21] Geisel T., Nierwetberg J., Zacherl A. *Accelerated diffusion in Josephson junctions and related chaotic systems*. Phys. Rev. Lett., **54** (1985) 616.
- [22] Bouchaud J.P., Georges A. *Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications*. Phys. Rep., **195** (1991) 127–293.
- [23] Schuster H.G., Just W. *Deterministic Chaos* (Wiley-VCH, Berlin, 2005), 4. Aufl..
- [24] Gaspard P. *Scattering and Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [25] Dorfman J. *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [26] Artuso R. *Diffusive dynamics and periodic orbits of dynamical systems*. Phys. Lett. A, **160** (1991) 528–530.
- [27] Zumofen G., Klafter J. *Scale-invariant motion in intermittent chaotic systems*. Phys. Rev. E, **47** (1993) 851–863.
- [28] Wang X.J., Hu C.K. *Anomalous diffusion in dynamical systems: Transport coefficients of all order*. Phys. Rev. E, **48** (1993) 728–733.
- [29] Artuso R., Casati G., Lombardi R. *Periodic orbit theory of anomalous diffusion*. Phys. Rev. Lett., **71** (1993) 62.
- [30] Stoop R. *Bivariate thermodynamic formalism and anomalous diffusion*. Phys. Rev. E, **49** (1994) 4913–4918.
- [31] Klages R., Dorfman J. *Simple maps with fractal diffusion coefficients*. Phys. Rev. Lett., **74** (1995) 387.
- [32] Radons G. *The thermodynamic formalism of random walks: Relevance for chaotic diffusion and multifractal measures*. Physics Reports, **290** (1997) 67–79.
- [33] Dräger J., Klafter J. *Strong anomaly in diffusion generated by iterated maps*. Phys. Rev. Lett., **84** (2000) 5998.
- [34] Radons G. *Anomalous transport in disordered dynamical systems*. Physica D, **187** (2004) 3.
- [35] van Beijeren H., Dorfman J. *Lyapunov exponents and Kolmogorov-Sinai entropy for the Lorentz gas at low densities*. Phys. Rev. Lett., **74** (1995) 4412–4415.
- [36] Radons G. *Suppression of chaotic diffusion by quenched disorder*. Phys. Rev. Lett., **77** (1996) 4748–4751.

- [37] Radons G. *Disorder phenomena in chaotic systems.* Adv. Solid State Phys., Festkörperprobleme, **38** (1999) 439.
- [38] Sinai Y. *The limiting behavior of a one-dimensional random walk in a random medium.* Theor. Prob. Appl., **27** (1982) 247.
- [39] Golosov A. *Localization of random walks in one-dimensional random environments.* Commun. Math. Phys., **92** (1984) 491–506.
- [40] Hughes B.D. *Random Walks and Random Environments, vol 2: Random Environments* (Clarendon Press, 1996).
- [41] Fichtner A., Radons G. *Disordered iterated maps: Spectral properties, escape rates and anomalous transport.* New J. Phys., **7** (2005) 30.
- [42] Temkin D. *One-dimensional random walks in two-component chain.* Soviet Mathematics Doklady, **13** (1972) 1172–1176.
- [43] Chernov A.A. *Replication of multicomponent chain by the 'lightning' mechanism.* Biophysics, **12** (1967) 336–341.
- [44] Anshelevich V.V., Vologodskii A.V. *Random walk on a one-dimensional inhomogeneous lattice.* J. Phys. A: Math. Gen., **15** (1982) 185–197.
- [45] Solomon F. *Random walks in a random environment.* The Annals of Probability, **3** (1975) 1–31.
- [46] Golosov A. *Limit distributions for random walks in random environments.* Soviet Mathematics Doklady, **28** (1983) 18–22.
- [47] Kesten H. *The limit distribution of Sinai's random walk in random environment.* Physica A, **138** (1986) 299–309.
- [48] Révész P. *Random Walk in Random and Non-Random Environments* (World Scientific Publishing, Singapore, 1990).
- [49] Zeitouni O. *Random walks in random environments.* J. Phys. A: Math. Gen., **39** (2006) 433–464.
- [50] Key E.S. *Recurrence and transience criteria for random walk in a random environment.* The Annals Probability, **12** (1984) 529–560.
- [51] Bolthausen E., Goldscheid I. *Recurrence and transience of random walks in random environments on a strip.* Communications in Mathematical Physics, **214** (2000) 429–447.
- [52] Glauber R.J. *Time-dependent statistics of the Ising model.* J. Math. Phys., **4** (1963) 294–307.
- [53] Hertz J.A., Palmer R.G., Krogh A. *Introduction to the Theory of Neural Computation* (Westview Press, 1991).
- [54] Knuth D.E. *The Art of Computer Programming* (Addison-Wesley, 1998).
- [55] Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 2001).

- [56] Bolthausen E., Goldsheid I. *Lingering random walks in random environment on a strip*. Communications in Mathematical Physics, **278** (2008) 258–288.
- [57] Gradshteyn I.S., Ryzhik I.M. *Tables of Integrals, Series and Products* (Academic Press, San Diego, 2000), 6. Aufl..
- [58] Bouchaud J.P., Comtet A., Georges A., Le Doussal P. *The relaxation-time spectrum of diffusion in a one-dimensional random medium: an exactly solvable case*. Europhys. Lett., **3** (1987) 653.
- [59] Nauenberg M. *Random walk in a random medium in one dimension*. J. Stat. Phys., **41** (1985) 803–810.
- [60] Laloux L., Le Doussal P. *Aging and diffusion in low dimensional environments*. Phys. Rev. E, **57** (1998) 6296–6326.
- [61] Lifshits I.M., Gredeskul S.A., Pastur L.A. *Introduction to the theory of disordered systems* (Wiley, New York, 1988).
- [62] Tel T., Vollmer J., Breymann W. *Transient chaos: the origin of transport in driven systems*. Europhysics Letters, **35** (1996) 659–664.
- [63] Noskowitz S., Goldhirsch I. *Average versus typical mean first-passage time in a random random walk*. Phys. Rev. Lett., **61** (1988) 500.
- [64] Noskowitz S., Goldhirsch I. *First-passage-time distribution in a random random walk*. Phys. Rev. A, **42** (1990) 2047–2064.
- [65] Radons G. *On the equilibrium state of random walkers in random environments: Analytical results*. J. Phys. A, **31** (1998) 4141.
- [66] Oshanin G., Mogutov A., Moreau M. *Steady flux in a continuous-space sinai chain*. J. Stat. Phys., **73** (1993) 379–388.
- [67] Comtet A., Monthus C., Yor M. *Exponential functionals of brownian motion and disordered systems*. J. Appl. Probab., **35** (1998) 255–271.
- [68] Landau L.D., Lifsic E.M. *Quantenmechanik*. Nr. 3 in Lehrbuch der Theroretischen Physik (Akademie-Verlag, 1988), 8. Aufl..
- [69] Stewart W.J. *Introduction to the Numerical Solution of Markov Chains* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1994).
- [70] Lebowitz J.L., Spohn H. *A Gallavotti-Cohen-type symmetric in the large deviation functional for stochastic dynamics*. Journal of Statistical Physics, **95** (1999) 333–365.
- [71] Gaspard P. *Time-reversed dynamical entropy and irreversibility in Markovian random processes*. Journal of Statistical Physics, **117** (2004) 599–615.
- [72] Gaspard P. *Fluctuation theorem for nonequilibrium reactions*. Journal of Chemical Physics, **120** (2004) 8898–8905.
- [73] Jiang D.Q., Qian M., Qian M.P. *Mathematical Theory of Nonequilibrium Steady States*, Bd. 1833/2003 von *Lecture Notes in Mathematics* (Springer, Berlin / Heidelberg, 2003).
- [74] Schnakenberg J. *Network theory of microscopic and macroscopic behavior of master equation systems*. Reviews of Modern Physics, **48** (1976) 571–585.

- [75] Jiu-li L., van den Broeck C., Nicolis G. *Stability criteria and fluctuations around nonequilibrium states*. Zeitschrift für Physik B - Condensed Matter, **56** (1984) 165–170.
- [76] Weiss G.H. *Aspects and Applications of the Random Walk*. Random Materials and Processes (North Holland, Amsterdam, 1994).
- [77] Weiss G.H. *Some applications of persistent random walks and the telegraphers equation*. Physica A, **311** (2002) 381–410.
- [78] van den Broeck C., Mazo R.M. *The asymptotic dispersion of particles and N-layer systems*. J. Chem. Phys., **81** (1984) 3624–3634.
- [79] Mazo R.M., van den Broeck C. *The asymptotic dispersion of particles in N-layer systems: Periodic boundary conditions*. J. Chem. Phys., **86** (1986) 454–459.
- [80] Derrida B., Pomeau Y. *Classical diffusion on a random chain*. Phys. Rev. Lett., **48** (1982) 627–630.
- [81] Derrida B. *Velocity and diffusion constant of a periodic one-dimensional hopping model*. J. Stat. Phys., **31** (1983) 433–450.

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig verfaßt habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel genutzt wurden.

Danksagung

Zu besonderem Dank bin ich Herrn Prof. Dr. Günter Radons für die Betreuung der vorliegenden Arbeit verpflichtet. Darüber hinaus gilt mein Dank den Kollegen in der Theoretischen Physik in Chemnitz, die mir jederzeit mit Rat und Tat zur Seite standen, sowie meiner Familie für ihrer moralische und finanzielle Unterstützung.

Lebenslauf

Persönliche Angaben

Name: Andreas Fichtner
Anschrift: Hübschmannstr. 22, 09112 Chemnitz
Geburtsdatum: geb. am 20.09.1978 in Meerane (Sachsen)

Schulausbildung

09/1985 - 07/1992 POS W.-I.-Lenin, Glauchau
08/1992 - 06/1997 Georgius-Agricola-Gymnasium, Glauchau
• math.-naturwissensch. Profil
• Abschluß: Allgemeine Hochschulreife

Wehrdienst

09/1997 - 07/1998 Grundwehrdienst

Hochschulausbildung

10/1998 - 11/2003 Physikstudium (Diplom), TU Chemnitz
• Wahlpflichtfächer: Statistik, Computerphysik
• Diplomarbeit: Chaoskontrolle mit zeitlich oszillierender zeitverzögerter Rückkopplung
• Abschluß: Diplom
12/2003 - 09/2008 wiss. Mitarbeiter an der Professur „Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik“
Betreuung der Übungen „Stochastische Prozesse in den Naturwissenschaften“, „Elektrodynamik“, „Kontinuumsmechanik“
04/2004 - 09/2008 Promotionsstudium Physik, TU Chemnitz
04/2005 - 04/2007 Aufbaustudium Investmentbanking, TU Chemnitz
• Abschluß: Zertifikat

Publikationen

Fichtner, Just, Radons, *Analytical investigation of modulated time-delayed feedback control*, J. Phys. A **37** (2004) 3385.

Fichtner, Radons, *Disordered iterated maps: Spectral properties, escape rates and anomalous transport*, New J. Phys. **7** (2005) 30.

Tagungen

DPG-Frühjahrstagungen 2004 (Regensburg), 2005 (Berlin), 2006 (Dresden), 2007 (Regensburg)

4. internationales Symposium „Investigation of Nonlinear Dynamic Effects in Production Systems“, Chemnitz (2003)

XXV Dynamics Days Europe, Berlin (2005)

373. Wilhelm und Else Heraeus Seminar zu „Anomalous Transport: Experimental Results and Theoretical Challenges“, Bad Honnef (2006)

Internationales Symposium „Nonlinear Dynamics of Nanosystems“, Chemnitz (2006)